

**K-Schalen Anregung
von hochionisierten Schwefelatomen**

Helmut Panke

1976

**K-Schalen Anregung
von hochionisierten Schwefelatomen**

**Inaugural-Dissertation
zur Erlangung des Doktorgrades
des Fachbereichs Physik
der Ludwig-Maximilians-Universität München**

vorgelegt von

Helmut Panke

aus Storkow

Januar 1976

1. Berichterstatter: Prof. Dr. F. Bell
2. Berichterstatter: Prof. Dr. J. Peisl

Tag der mündlichen Prüfung: 26.2.1976



Zusammenfassung

Am Tandem van de Graaff Beschleuniger in Garching wurde ein Meßplatz zur Untersuchung von Röntgenstrahlung, die in Schwerionen-Atom Stößen angeregt wird, aufgebaut. Teil dieser Apparatur ist ein ebenes Kristallspektrometer, mit welchem z.B. eine Energieauflösung von 3.8 eV bei einer Röntgenenergie von 2.6 keV erreicht wurde. Mit dem Spektrometer wurde Projektilröntgenstrahlung untersucht, die beim Durchflug von 92 MeV Schwefel Ionen durch dünne Folientargets induziert wird. Auf Grund relativistischer Hartree-Fock Rechnungen konnte die beobachtete Strahlung Übergängen in Wasserstoff-, Helium- und Lithium-ähnlichen Ionen zugeordnet werden. Messungen der Röntgenausbeute für einzelne Multiplettübergänge zeigten ein nicht-proportionales Anwachsen mit der Targetdicke, bedingt durch einen von der Targetdicke unabhängigen Beitrag von Emission in Übergängen hinter dem Target. Dieser neue Effekt wurde angewendet, um totale Lebensdauern von prompt zerfallenden angeregten Zuständen zu bestimmen. Diese Zeiten liegen in der Größenordnung der Durchflugszeit des Ions durch das Target. ($\sim 10^{-14}$ sec). Die Nichtproportionalität der Röntgenausbeute zur Targetdicke erlaubte außerdem die Bestimmung der Gleichgewichtsbesetzung angeregter Multiplettzustände innerer Projektilschalen innerhalb des Targets. Dabei konnte gezeigt werden, daß die Gleichgewichtspopulation der angeregten Zustände im wesentlichen durch das Verhältnis der Wirkungsquerschnitte für Ionisierung und nicht-strahlenden Elektroneneinfang im Festkörpertarget bestimmt wird.

<u>Einleitung</u>	1
1. <u>Aufbau der Meßapparatur</u>	2
1.1 Strahlführungssystem	2
1.2 Gastarget	7
1.3 Ladungsseparator	7
1.4 Streukammer	8
1.5 Kristallspektrometer	8
1.5.1 Aufbau	8
1.5.2 Vollautomatische Steuerung des Spektrometers	12
1.5.3 Eichung des Spektrometers	18
1.5.4 Analysatorkristalle	20
1.5.5 Auflösungsvermögen	20
1.5.6 Reflektivität der Kristalle	21
1.5.7 Nachweisempfindlichkeit des Spektrometers	23
2. <u>Spektroskopie und Identifikation von Übergängen</u>	26
2.1. Beobachtete Spektren	27
2.1.1 Messungen mit Si(Li) Detektoren	27
2.1.2 Spektrometermessungen	30
2.2 Identifikation von Übergängen	30
2.2.1 Korrektur der Dopplerverschiebung	30
2.2.2 Hartree-Fock Rechnungen	35
2.2.3 Beobachtung der Strahlung von Übergängen mit $\Delta S \neq 0$	42
2.2.4 Diskussion des Abstands $^3P - ^1P$	44

	Seite
2.2.5	Einfluß von äußeren Elektronen 49
2.2.6	Linienbreiten und Untergrund in den Spektren 50
2.3	Vergleich mit den Ergebnissen anderer Autoren 54
3.	<u>Lebensdauer von Multipllettzuständen</u> 57
3.1	Targetdickenabhängigkeit der Produktion von Projektilstrahlung 57
3.2	Allgemeines Modell zur Beschreibung der nicht-proportionalen Röntgenausbeute 61
3.3	Beschreibung durch ein System von Raten- gleichungen 66
3.4	Bestimmung der Lebensdauer angeregter Zustände 69
4.	<u>Gleichgewichtsbesetzungen angeregter Zustände</u> 73
4.1	Besetzung von Multipllettzuständen für 92 MeV S auf C und Al 73
4.2	Energieabhängigkeit der Multipllettintensität 75
4.3	Vergleich mit Grundzustands-Ladungsvertei- lungen 78
5.	<u>Einfluß des Elektroneneinfangs auf die relative Stärke von Hypersatelliten</u> 80
5.1	2 Komponenten Modell für die Röntgenausbeute 80
5.2	Größe der Wirkungsquerschnitte 82
5.2.1	Relaxation durch strahlende und nichtstrahlende Übergänge 82
5.2.2	Ionisierung von K und L Elektronen 82
5.2.3	Einfang eines Elektrons in die K Schale des Projektils 83

	Seite
5.2.4 Anregung eines K Elektrons	84
5.3 Theoretische Photonen ausbeuten	84
5.4 Verhältnis der Röntgen ausbeuten für Übergänge mit einem und zwei Löchern in der K-Schale	85

Literaturverzeichnis

Einleitung

Beim Durchflug schneller Ionen durch Materie werden auf Grund der Coulombwechselwirkung zwischen dem Kern eines Targetatoms und den Elektronen des Projektilions Ladungsaustauschvorgänge und Anregungen des Projektils beobachtet. Durch die miteinander konkurrierenden Prozesse der Ionisation und des Elektroneneinfangs kann in einem Strahl schneller Ionen ein Ladungsgleichgewicht eingestellt werden, das für 100 MeV Schwefelionen etwa bei einer mittleren Ladung von $13+$ liegt: die Ionen eines 100 MeV Schwefel Strahls besitzen im Mittel nur noch zwei oder drei Elektronen. Strahlende Übergänge aus angeregten Zuständen dieser wenig-Elektronen-Systeme emittieren Quanten mit Wellenlängen im Röntgengebiet. Die Spektroskopie dieser Strahlung und die Messung ihrer absoluten Intensität erlauben Aussagen über Art und Ausmaß der mittleren atomaren Anregung von schnellen Ionen beim Durchgang durch Materie.

1. Aufbau der Meßapparatur

Für Experimente im Rahmen der Atomphysik mit energiereichen schweren Ionen ist am Tandem van de Graaff Beschleuniger in Garching eine Meßapparatur geplant und aufgebaut worden.

Auf Grund der Problemstellungen

- a) Bestimmung der Ladungsverteilungen von Ionen nach dem Durchgang durch Gas- oder Folientargets
- b) Untersuchung der Besetzung von angeregten Zuständen durch Beobachtung der emittierten Röntgenstrahlung
- c) Studium der bei Schwerionen-Atom Stößen beobachteten Kontinuumstrahlungen

gliedert sich der Aufbau der Meßapparatur am -40° Strahlrohr in der Targethalle I in drei Grundsysteme, siehe Abbildungen 1,2:

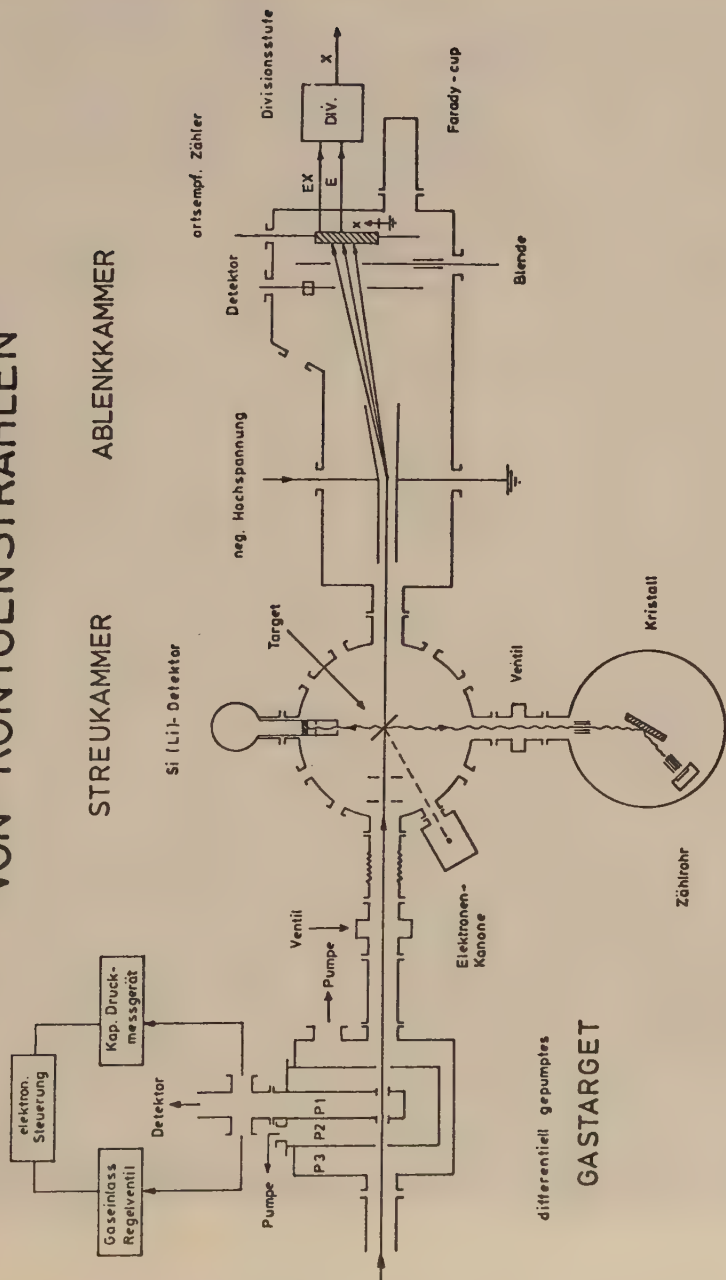
- i) differentiell gepumptes fensterloses Gastarget.
- ii) Streukammer für Folientargets mit Verwendungsmöglichkeiten für verschiedene Röntgenzähler, u.a. einem ebenen Kristallspektrometer.
- iii) elektrostatischer Ladungsseparator.

1.1. Strahlführungssystem

Zur Sicherstellung einer reproduzierbaren Strahllage in der Apparatur befindet sich ein System von Blenden im Strahlrohr. Abbildung 3. Alle Blenden sind auswechselbar, zusätzlich zu den Elementen, die in Abbildung 3 angegeben sind, kann das Gastarget mit jeweils zwei Eintritts- und Austrittsblenden zwischen den Positionen 4 und 5 eingebaut werden.

Mit den in der Abbildung 3 angegebenen Blendenöffnungen erhält man bei einer Ionenstrahldivergenz von 3.4 mrad einen Strahlfleck von 4 mm Durchmesser am Targetort in der Streukammer. Zusätzlich befinden sich am Strahlrohr ein magnetisches Quadrupol-

EXPERIMENTIERPLATZ ZUR MESSUNG VON RÖNTGENSTRAHLEN



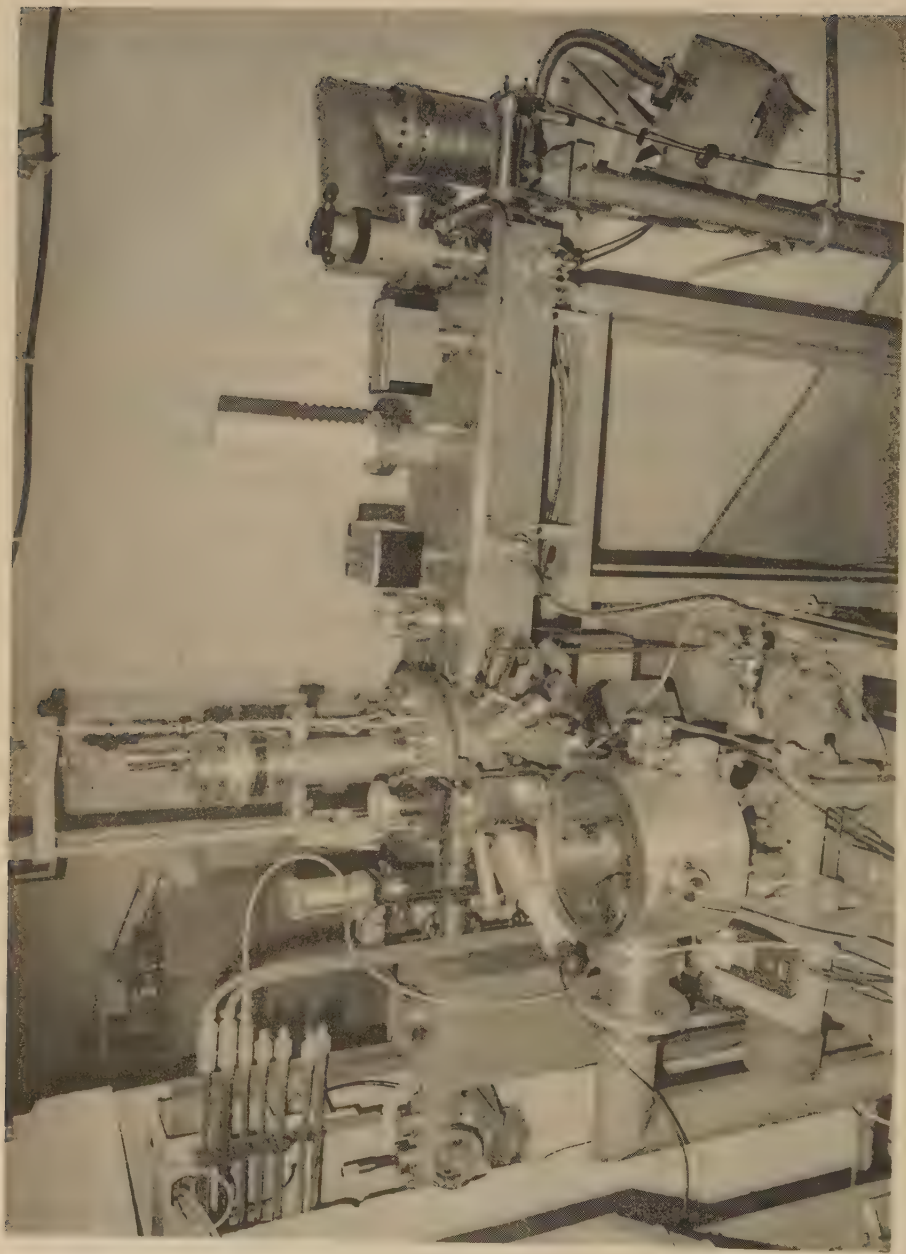


Abb. 2: Ansicht des Mesplatzes am -40° Strahlrohr in Targethalle I

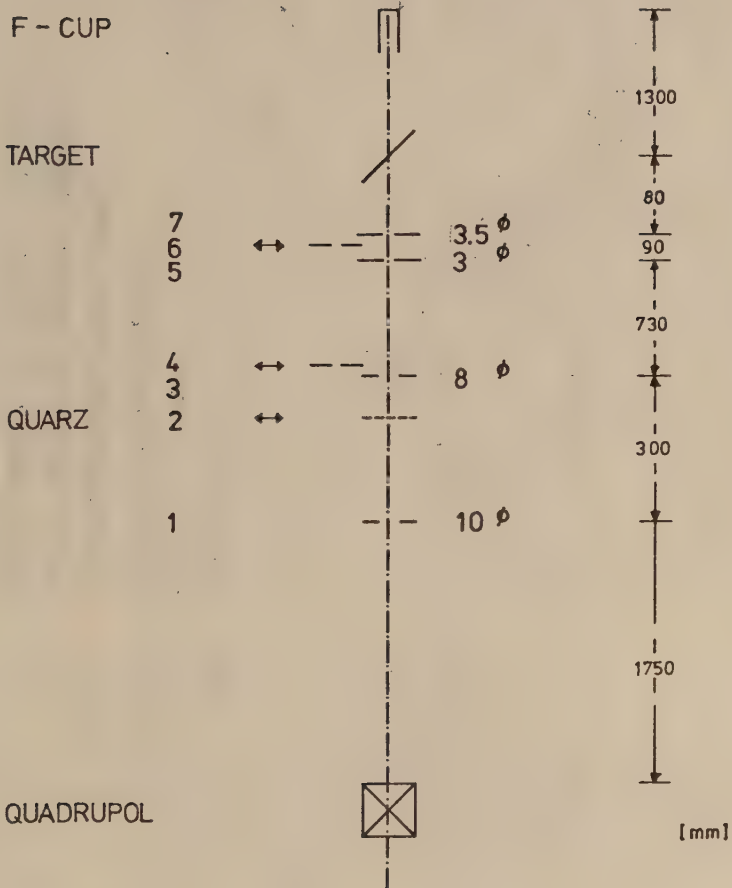
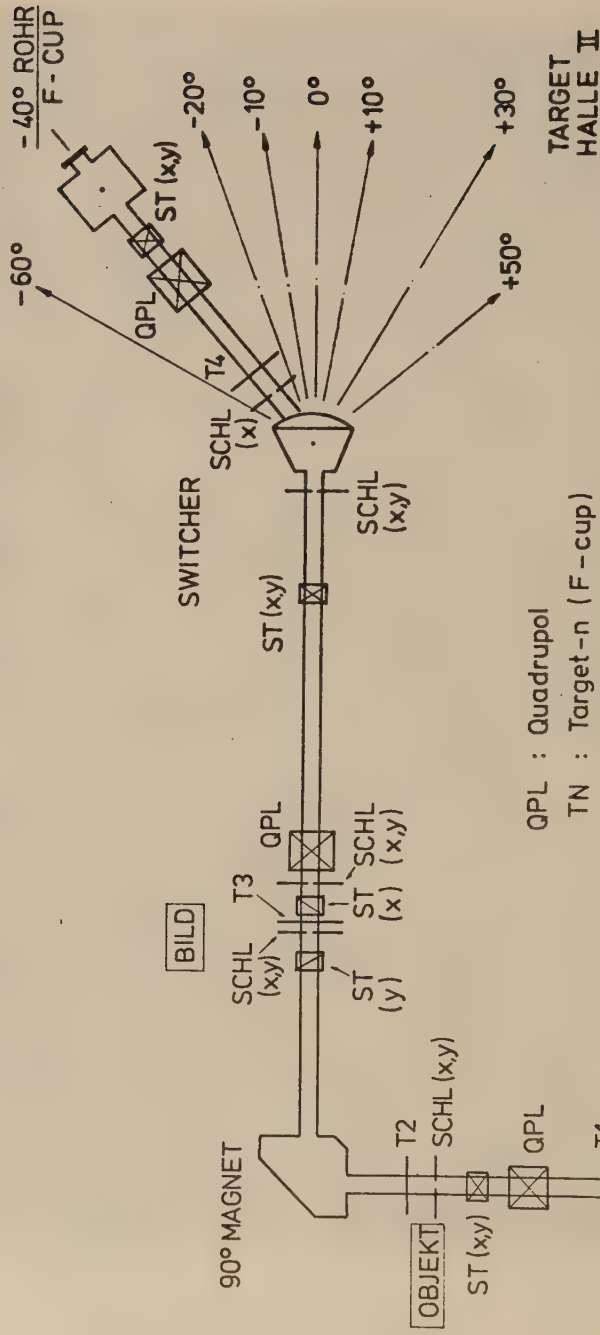


Abb. 3: Blendensystem zur Strahlführung

Strahlführungssystem

vom Beschleunigertank bis zum -40° Rohr

am Tandem VAN-DE-GRAAFF Beschleuniger GARCHING



QPL : Quadrupol

TN : Target-n (F-cup)

SCHL (x) : Strahlbegrenzung (seitlich)

SCHL (y) : Strahlbegrenzung (oben, unten)

ST (x) : Beam-Steerer für horizont. Ablenkung

ST (y) : Beam-Steerer für vertikal. Ablenkung

dublett zur Fokussierung und ein Paar Steuermagnete zur Verkipfung des Strahls. Bei allen Experimenten an diesem Meßplatz ist grundsätzlich zu beachten, daß ein Fokus des Ionenstrahls am Ort der (x,y) Schlitze vor dem Verteilmagneten liegen muß (siehe Abbildung 4).

1.2 Gastarget

Das Gastarget besteht aus einem dreistufigen Vakuumsystem, bei dem das äußere Volumen direkt mit dem Strahlrohr verbunden ist, in dem stets Vakuum mit Drücken kleiner als 10^{-7} Torr vorliegt. Das separat gepumpte mittlere Volumen erlaubt durch geeignete Wahl von Strahlblenden einen etwa 10^3 bis 10^4 höheren Druck, ohne das Strahlrohrvakuum zu beeinträchtigen. Der innere Raum, das eigentliche Target, kann auf Grund von Blenden mit 1 bis 2 mm Durchmesser einen Targetdruck von 10^{-3} Torr bis 1 Torr halten. Der Vorteil eines solchen (differentiell gepumpten) Gastargets liegt darin, daß keine Festkörpereffekte auf Grund von dünnen Fensterfolien die Messungen im Gas verfälschen können. Eine detaillierte Beschreibung der Ausführung unseres Gastargets findet sich bei M. Welz /1/.

1.3 Ladungsseparator

Für die Untersuchung der Ladungsverteilungen von Ionen nach dem Durchgang durch Materie werden sowohl magnetische als auch elektrische Ladungsseparatoren verwendet. Hauptelement unseres Separators ist ein Plattenkondensator, der für elektrische Feldstärken bis zu 100 kV/cm am Strahlort ausgelegt ist. Nach einer Driftstrecke werden die einzelnen Ladungskomponenten des Strahls mit einem ortsempfindlichen Halbleiterdetektor registriert. Ausführung und Eigenschaften des Ladungsseparators sind im Rahmen der Diplomarbeit von G. Kalkoffen beschrieben /2/.

1.4 Streukammer

Die Streukammer besitzt in der unteren Hälfte integriert ein abtrennbares 220 l/sec Ionengetter-Pumpsystem. In Strahlhöhe befinden sich an der Kammerwand 11 CF-Flansche. Auf dem abnehmbaren Kammerdeckel (Innendurchmesser 14") sind zentral ein Flansch NW 100 CF und auf einem dazu konzentrischen Kreis weitere acht Flansche NW 35 CF angebracht. Durch den zentralen Flansch erfolgt der Einschub der Folientargets. Hierfür ist ein Targetwechsler für 50 Targets auf Standardrähmchen 1/2" x 1" gebaut worden (siehe Abbildung 5).

Unterhalb der Strahlhöhe sind in der Kammer zwei unabhängig voneinander bewegbare Drehplatten eingebaut. Hier können z.B. Halbleiterzähler zum Nachweis von gestreuten Ionen oder Proportionalzählrohre aufgebaut werden. Durch die beiden Drehplatten wird außerdem die Röntgenstrahlung abgeschirmt, die in den Pumpelementen der integrierten Ionengetterpumpe entsteht.

An einem der Flansche in Strahlhöhe ist eine Elektronenkanone angebracht. Dies erlaubt Testmessungen und Eichungen unter Experimentalbedingungen, ohne auf den Ionenstrahl angewiesen zu sein.

1.5 Kristallspektrometer

1.5.1 Aufbau

Zur hochauflösenden Untersuchung der emittierten Röntgenstrahlung ist senkrecht zur Strahlrichtung ein Kristallspektrometer an der Streukammer angeflanscht. (siehe Abbildungen 1,2,6).

Das Spektrometer wurde von H. Mette /3/ entworfen. Es arbeitet nach dem Verfahren von Soller /4/, (siehe Abb. 7): Dabei wird das Bragg Verfahren für ebene Analysatorkristalle erweitert auf ausgedehnte Strahlungsquellen. Durch die Verwendung eines Satzes paralleler Platten, sog. Sollerspalt, als Eingangskollimator anstelle des einzelnen Spaltes kann die gesamte Fläche der Strahlungs-

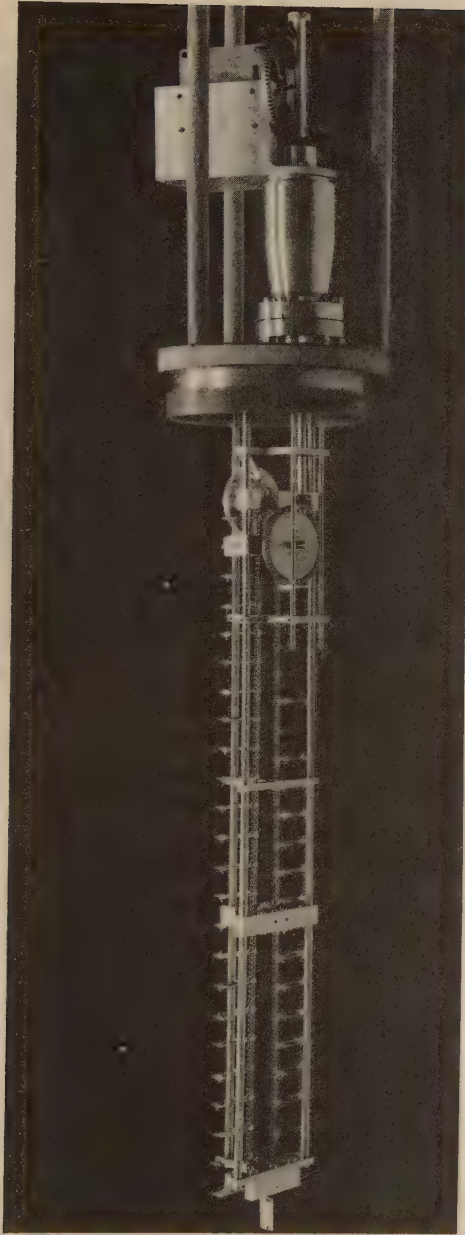


Abb. 5: Targeteinschub



Abb. 6: Kristallspektrometer

quelle für die Beobachtung ausgenutzt werden.

Das Spektrometer hat einen zentralen Kristallhalter für 4 ebene Analysatorkristalle der Größe 25 x 50 mm. Die Dicke der Kristalle kann zwischen einigen μm und 4 mm liegen. Durch Verschiebung des Kristallhalters läßt es sich stets einrichten, daß die Drehachse der Kristallbewegung in der Oberflächenebene des Analysatorkristalls verläuft.

Unabhängig von der Drehbewegung können die Kristalle von außen gewechselt werden, ohne daß hierfür das Spektrometer belüftet werden muß. Die Kegelnzahnäder des Spektrometers bewirken eine Untersetzung von 4.5 : 1 für die Drehung des Röntgenzählers und von 9 : 1 für die Drehung des Kristalls. Beide Bewegungen erfolgen über die selbe Antriebsachse. Um die kleinen Winkelschritte

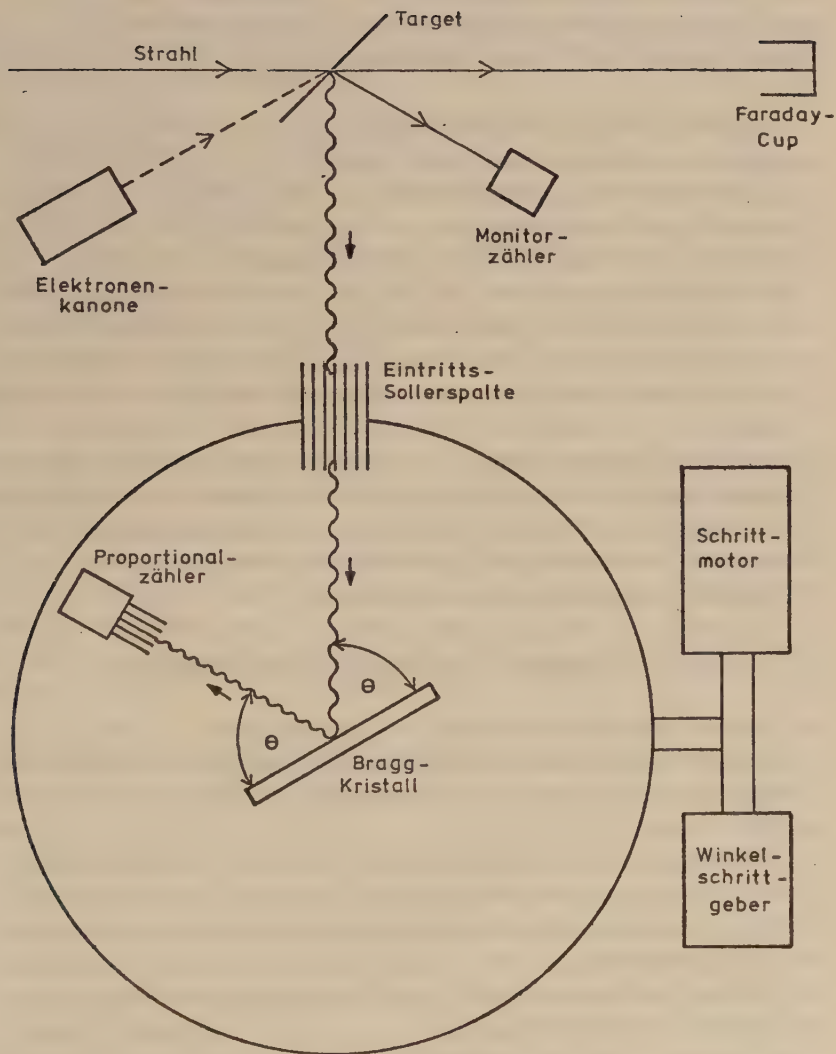


Abb. 7: Prinzip der Messung mit dem Spektrometer

zu erhalten, die für hochauflösende Messungen notwendig sind, ist der Antrieb über Schneckenrad und Schneckenwelle mit einer zusätzlichen Untersetzung von 38 : 1 an einen Schrittmotor KINEX 52.2.200 mit einem Einzelschrittinkel von 1.8° gekoppelt.

Als Nachweisgerät für die Röntgenstrahlung dient ein Durchfluß-proportionalzählrohr der Firma Siemens. Der verwendete Zähler (Typ 'F') erlaubt leichten Wechsel von Zähldrähten und Fensterfolien und damit eine Anpassung an das jeweilige Experiment. Der Zähler ist auf dem unteren Kegelrad befestigt und durch 2 flexible Schlauchverbindungen über die Mitte des Spektrometerbodens mit der Zählgasversorgung verbunden. Zur Abschirmung des großflächigen Zählerfensters ($20 \times 30 \text{ mm}^2$) vor Streustrahlung befindet sich ein Plattenkollimator mit einer Durchlaßdivergenz von 1° vor dem Zähler.

In den Experimenten wurden $2 \mu\text{m}$ dicke Makrofol Fensterfolien verwendet, deren Transmission im Bereich der S(K) Strahlung etwa 90 % beträgt. Als Zählgas wird P10, eine Gasmischung aus 90 % Argon und 10 % Methan mit einer Durchflußmenge von 4 ltr pro Stunde bei Atmosphärendruck verwendet.

1.5.2 Vollautomatische Steuerung des Spektrometers

Um den automatischen Betrieb des Spektrometers zu ermöglichen, wurde eine vollautomatisierte Steuerung geplant und gebaut. Leitgedanken für diese Steuerung des schrittmotorgetriebenen Spektrometers waren:

- i) Der Betrieb muß vielseitig möglich sein. Experimente mit Vielkanalanalysatoren (mit und ohne Multichannel-Betrieb) müssen ebenso möglich sein, wie eine Verwendung mit Computer-On-Line Systemen.
- ii) Soweit möglich sollen Standard-Elektronikbauteile wie z.B. NIM Zähler verwendet werden.

Als Ergebnis gibt es 2 automatische Steuerungen, von denen eine vollkommen modular aufgebaut ist, während die zweite eine Vielzahl der externen Module integriert enthält.

a) Modulare Steuerung

Für Messungen mit diesem System werden außer den neu entwickelten Geräten Spektrometersteuerung und Spektrometerversorgung folgende externe Zusatzgeräte verwendet:

- i) ein Vorwahlzähler für die Registrierung der Kanalnummer des Spektrums. (z.B. ORTEC 771)
- ii) ein Vorwahlzähler für die Registrierung der Normierungsimpulse (z.B. ORTEC 773)
- iii) NIM Zähler zur Registrierung der Röntgenimpulse aus dem Spektrometer
- iv) ein Zeilendrucker zur Ausgabe der Zählerinhalte am Ende jeder Messung (z.B. ORTEC 777)

Diese einfache Betriebsversion erlaubt einen Meßbetrieb unabhängig von Vielkanalanalysatoren oder on-line Rechnern. Die Daten werden für jeden Meßpunkt durch den Zeilendrucker auf Papierstreifen ausgegeben (Kanalnummer, Normierungsimpulse, Röntgenimpulse). Zugleich kann diese Version parallel mit einem Vielkanalanalysator in Multichannel-Mode verwendet werden. Der Taktimpuls, der als Kanalnummer gezählt wird, wird parallel als externes MCS-Signal in den Vielkanalanalysator gegeben. Akkumulation der Daten im Analysator erfolgt dann in Koinzidenz mit dem inhibit Signal der Steuerung.

Bei Verwendung eines Vielkanals ohne Multichannel Mode, bzw. bei Verwendung von Computern werden als zusätzliche Module verwendet:

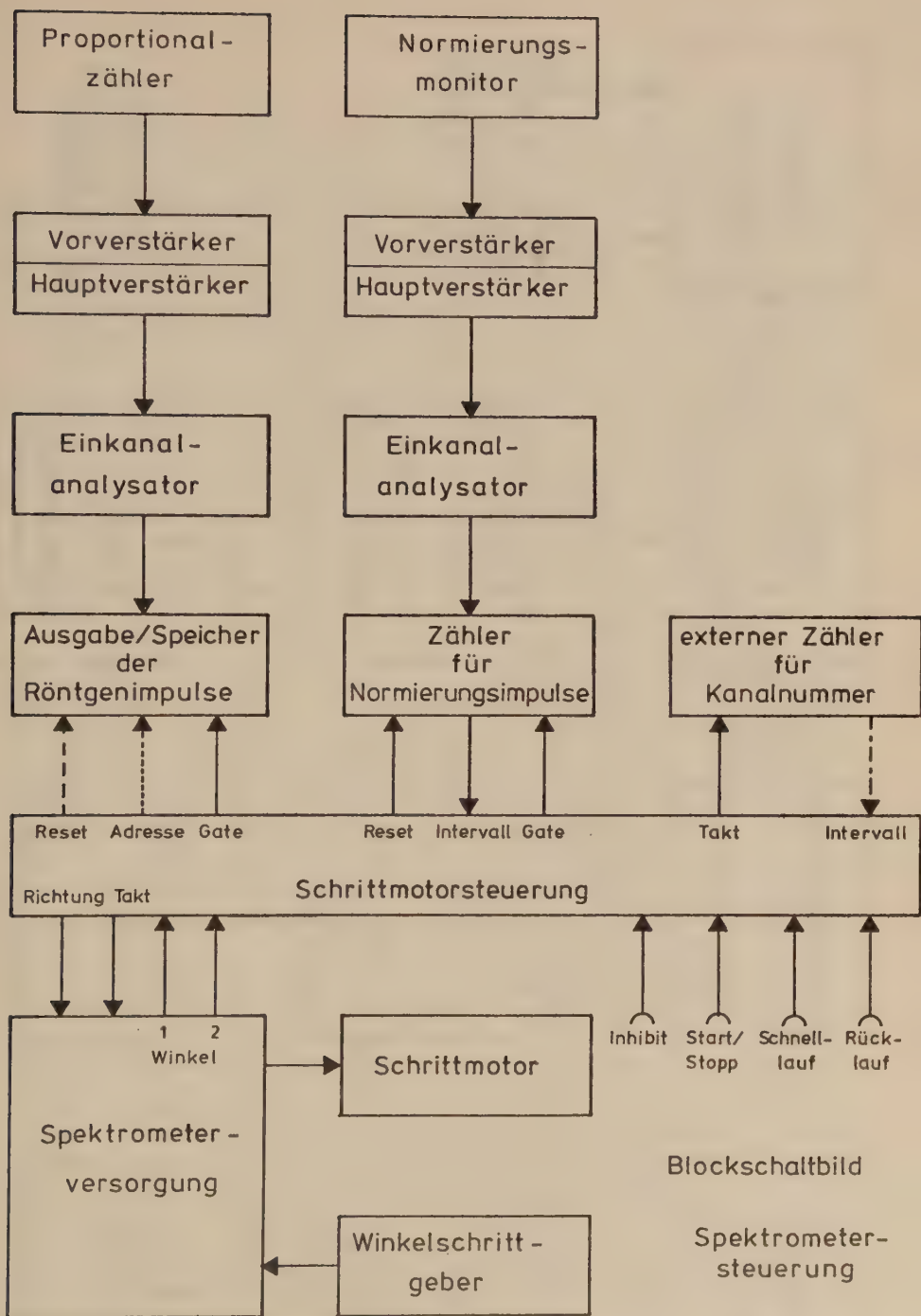
- (v) Vorwärts-Rückwärts Binärzähler zur Erzeugung einer Binär Adresse für
- (vi) einen DAC, der die Röntgenimpulse je nach Kanalnummer zu verschieden hohen Impulsen umformt, die dann über den ADC Eingang in Vielkanalanalysatoren und Rechnern verarbeitet werden können
oder
- (vii) einen Digital-Digital-Wandler (DDC): Dieses Modul ist für die Verwendung mit dem PDP 8/PDP 10 Online Computer gebaut. Es wird anstelle eines ADC mit dem Rechner verbunden. Der DDC sortiert die ankommenden Röntgenimpulse je nach anliegender Adresse in den zugehörigen Kanal des Online-Spektrums.

b) Integrierte Steuerung

Mit dem komplexeren System sind ebenfalls sämtliche Betriebsarten wie mit dem modularen System möglich. Integriert sind hier bereits die Aufgaben des Kanalnummernzählers (iii) und des Binärzählers für den Betrieb mit DAC oder DDC. Zusätzlich ist ein automatischer Nullpunktrücklauf eingebaut, der zur Verminderung des Einflusses von Spiel in der Spektrometerumsetzung über den Nullpunkt einer Messung hinaus fährt, dort umdreht und stets in Vorwärtsrichtung in den Nullpunkt läuft und dort anhält. Neben zahlreichen Sicherungen gegen Fehlbedienungen hat die integrierte Steuerung eine größere Flexibilität in der Wahl des Winkelschritts zwischen 2 Meßpunkten.

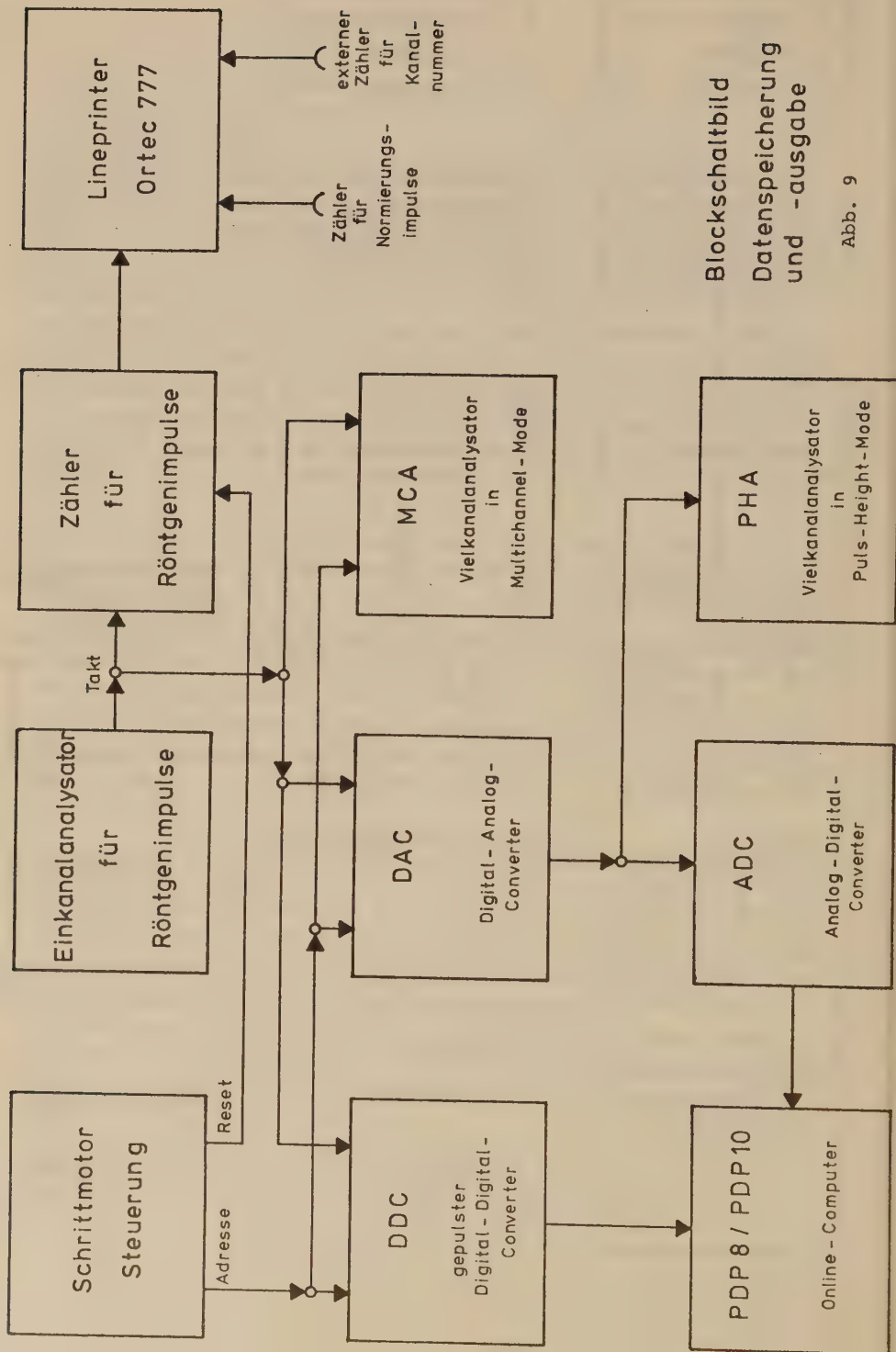
Der Drehwinkel des verwendeten KINEX Schrittmotors von 1.8° für einen einzelnen Winkelschritt führt zu einer Verdrehung des Analysatorkristalls um 0.0053° . Die modulare Steuerung erlaubt die Vorwahl von 1 bis 15 Motorschritten zwischen zwei Meßpunkten. Diese Zahl kann noch durch einen eingebauten Multiplikator verdoppelt werden. Dadurch sind bei geringeren Anforderungen an das Auflösungsvermögen des Spektrometers größere Winkelschritte zwischen den Meßpunkten möglich. Bei der integrierten Steuerung können bis zu 999 Motorschritte als Abstand von 2 Meßpunkten eingestellt werden.

Abbildung 8 zeigt das Blockschaltbild der Spektrometersteuerung. Dieses Bild gilt sowohl für die modulare als auch für die integrierte Steuerung. Das Blockschaltbild für die Möglichkeiten der Datenspeicherung und -ausgabe, Abbildung 9, gilt für beide Steuerungen. In Abbildung 10 ist das Blockschaltbild für den Aufbau der integrierten Steuerung wiedergegeben. Die Abbildungen 8, 9, 10 sind der Diplomarbeit von W. Stehling entnommen, in der der detaillierte Aufbau und die Arbeitsweise beider Steuerungen beschrieben ist /5/.



Blockschaltbild

Spektrometer-
steuerung



Blockschaltbild
Datenspeicherung
und -ausgabe

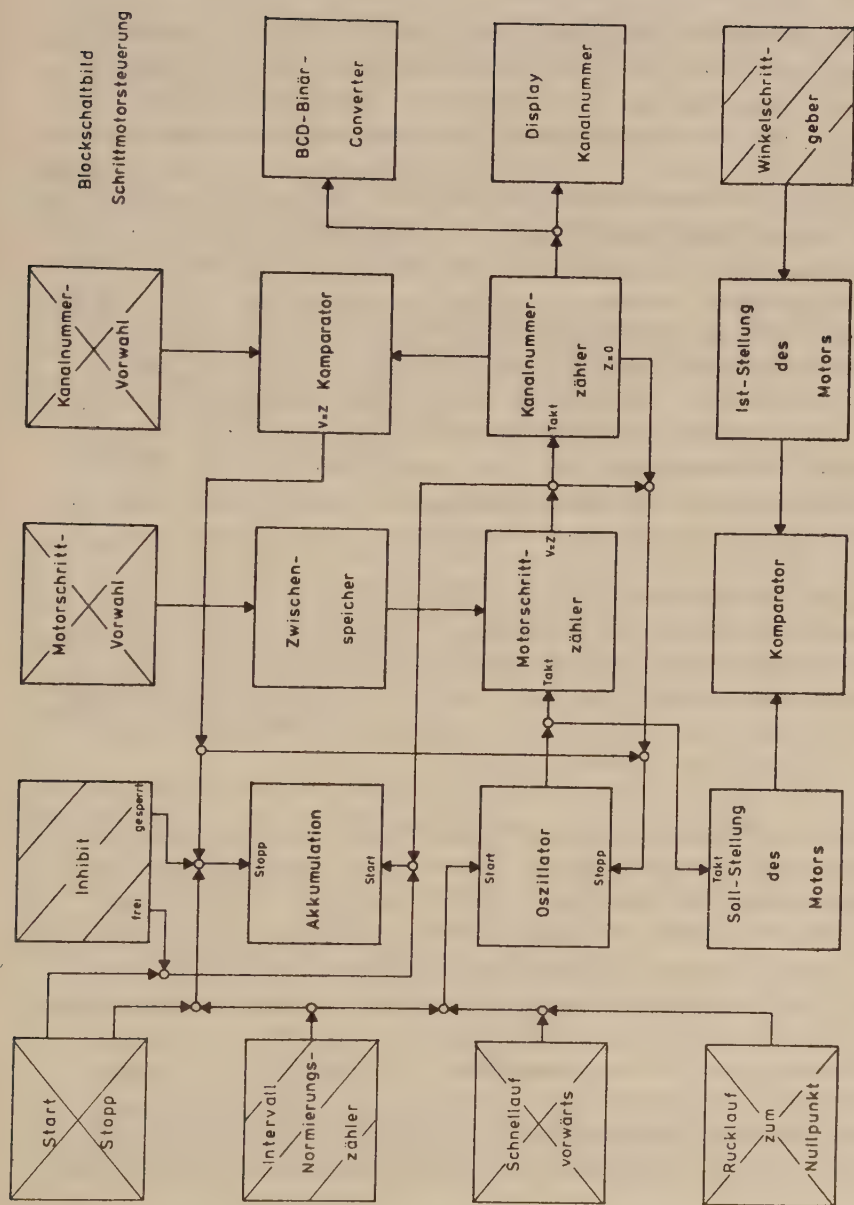


Abb. 10

1.5.3 Eichung des Spektrometers

Ausgehend von der Bragg-Beziehung läßt sich mit der bekannten Übergangsenergie einer beobachteten Röntgenlinie eine Relativeichung aller übrigen experimentellen Linien durchführen. Hierfür muß der absolute Nullpunkt der Winkelskala nicht notwendigerweise bekannt sein. Durch die Bestimmung von Winkeldifferenzen in Bezug auf den Beobachtungswinkel des bekannten Übergangs läßt sich die Wellenlängendifferenz zur bekannten Linie und so die Übergangsenergie bestimmen. Für die Bestimmung von Übergangsenergien angeregter Zustände von schnellen Projektilen, z.B. 100 MeV Schwefel-Ionen, muß berücksichtigt werden, daß die beobachtete Energie auf Grund der Dopplerverschiebung verschieden ist von der im Projektil emittierten Energie der Strahlung. Selbst bei Beobachtung unter 90° zur Bewegungsrichtung der Ionen beträgt die Dopplerverschiebung für eine Übergangsenergie von 2500 eV in Schwefel-Ionen mit einer Energie von 100 MeV etwa 7 eV. Die Korrektur der Dopplerverschiebung wird in 2.2.1 diskutiert.

Als Bezugslinie für eine Relativeichung könnte in hier beschriebenen Experimenten ein Übergang in Wasserstoff-ähnlichem Schwefel verwendet werden: Unter der Annahme einer statistischen Besetzung der auf Grund der Spin-Bahn Wechselwirkung aufgespaltenen Zustände erhält man für den Übergang $(2p)^2P - (1s)^2S$ eine Übergangsenergie von 2621.63 eV.

Die Identifizierung dieses Übergangs kann nur über eine Absoluteichung des Spektrometers mit Hilfe von Eichmessungen mit der Elektronenkanone vorgenommen werden. Zu diesem Zweck werden ZnS, Mo, KCl und K_2SO_4 Targets mit 9 keV Elektronen beschossen. Die dabei angeregte charakteristische Strahlung wird mit dem Spektrometer gemessen. Unter der Annahme bekannter Übergangsenergien für die beobachteten K_α und K_β Linien läßt sich dann die beobachtete Wellenlänge einem Kanal im Spektrum, d.h. einem bestimmten Bragg-Winkel und damit einer definierten Motorstellung, zuordnen. Der Vergleich mit theoretischen Beobachtungswinkeln liefert einen Term $P(2)$ für die Nullpunktskorrektur in

der Bragg-Beziehung. Eine zusätzliche Variable ist der Gitterabstand $2d$ des Analysatorkristalls, bei dem die Änderungen jedoch kleiner als 1 % des Wertes sind, der von der Lieferfirma angegeben wird. Für die Absoluteichung des Spektrometers wurde deshalb die Funktion

$$n \cdot \lambda = (2d + P(1)) \cdot \sin(\theta_0 - \theta_b + P(2))$$

aufgestellt mit θ_0 dem eingestellten Nullpunkt der Winkelskala, θ_b dem mittels eines Gauß-Fits bestimmten Schwerpunkt der Röntgenlinie und den 2 Parametern $P(1)$ und $P(2)$.

Die Bestimmung der Parameter erfolgt simultan in einem Mehr-Parameter-Fitprogramm. Eingabewerte in dieses Fortran-Programm sind die Wertepaare theoretische Wellenlänge - beobachteter Winkel. Das Ergebnis für Messungen mit dem ADP Kristall in 2. Ordnung ist die Beziehung

$$2 \lambda = (10.648 - 0.002) \sin[(151.5^\circ - \theta_b + 135^\circ)/2] \quad [\text{\AA}]$$

Die Fehler der beobachteten Winkelposition der Linien ist $\pm 0.0175^\circ$ und führt zu einem Fehler in der Linienenergie von ± 0.1 eV bei einer beobachteten Linienenergie von 2450 eV. Der Fehler der theoretischen Übergangsenergie ist bedingt durch die Verschiebung der Energieniveaus von S, Cl, K in den vorliegenden chemischen Verbindungen.

Für die verwendeten Verbindungen K_2SO_4 , KCl und $ZnSO_4$ sollte dieser Fehler bei den Eichlinien kleiner als ± 1 eV sein /6,7/.

Für die Bestimmung der Übergangsenergien der Projektilstrahlung im Fall 92 MeV S $\rightarrow$ Al bzw. C tritt zusätzlich das Problem der Dopplerverschiebung auf. Gemäß der Beziehung

$$E_{\text{beob.}} = E_{\text{emit.}} \frac{\sqrt{1 - v^2/c^2}}{1 - v/c \cdot \cos \alpha}$$

(mit v/c dem Verhältnis der Projektilgeschwindigkeit zur Lichtgeschwindigkeit und α dem Winkel der Beobachtung zur Bewegungs-

richtung des Projektils) ist die beobachtete Linienenergie eine Funktion der Geschwindigkeit und des Beobachtungswinkels. (siehe 2.2.1) Auf Grund des mechanischen Aufbaus der Apparatur läßt sich der Beobachtungswinkel des Spektrometers nur mit einem Fehler von $\pm 1^\circ$ als 90° festlegen. Dies führt für 92 MeV S Ionen bei einer beobachteten Übergangsenergie von 2450 eV zu einem Fehler von ± 4.4 eV.

Der dominierende Fehler auf Grund der Dopplerverschiebung läßt sich jedoch durch eine Kombination der vorher beschriebenen Relativ-Eichung mit der Absoluteichung ausschließen, indem der genaue Beobachtungswinkel durch Identifikation eines Übergangs im beobachteten Spektrum bestimmt wird.

1.5.4 Analysatorkristalle

Bei den Experimenten zur Untersuchung der Schwefel (K) Röntgenstrahlung wurden drei Analysatorkristalle verwendet:

- (i) ADP, Ammoniumdihydrogenphosphat, $2d = 10.648 \text{ \AA}$
- (ii) NaCl, Natriumchlorid, $2d = 5.640 \text{ \AA}$
- (iii) EDDt, Ethylendiaminditartrat, $2d = 8.808 \text{ \AA}$

Die Kristalle wurden von Quartz & Silice, Paris geliefert. Bei Messungen mit dem ADP Kristall wurde die in 2. Ordnung, mit den beiden anderen Kristallen die in 1. Ordnung reflektierte Röntgenstrahlung beobachtet.

1.5.5 Auflösungsvermögen

Ausgehend von der Bragg-Bedingung ist zu erkennen, daß das Auflösungsvermögen des Spektrometers keine lineare Funktion der Röntgenenergie ist. Die Winkeldispersion

$$D_\theta = \Delta\theta / \Delta\lambda = n / (2d \cos\theta)$$

zeigt, daß man bei vorgegebener Eingangsstrahldivergenz $\Delta\theta$ der in das Spektrometer eintretenden Strahlung möglichst bei großen Bragg-Winkeln θ messen sollte, um gute Auflösung zu

erzielen. Für die verwendeten Kristalle erhält man für eine Energie von 2450 eV der beobachteten Strahlung eine Winkeldispersion

(i) $D_{\Theta}(\text{ADP}) = 0.604;$

(ii) $D_{\Theta}(\text{NaCl}) = 0.402;$

(iii) $D_{\Theta}(\text{EDdT}) = 0.139$

Für jeden verwendeten Kristall kann durch Eichmessungen die Größe des apparativen Beitrags $2d/n \cdot \Delta\Theta$ bestimmt werden. Unter der Annahme, daß diese Größe über den gesamten beobachteten Winkelbereich für einen Kristall konstant ist, läßt sich dann für jeden verwendeten Kristall die zu erwartende Energieauflösung ΔE als Funktion der Röntgenenergie E berechnen.

In Abbildung 11 sind so gewonnene Kurven für die drei verwendeten Kristalle wiedergegeben. Dabei wird deutlich, daß die Entscheidung, welcher Aufbau die bessere Auflösung liefert, abhängig ist von der Energie der untersuchten Strahlung. Durch die Verwendung von Sollerspalt mit kleinerer Durchlaßwinkeldivergenz kann die Auflösung des Spektrometers verbessert werden. Jedoch muß die Mosaikstruktur des Analysatorkristalls stets kleiner sein als die Winkeldivergenz der gemessenen Strahlung.

1.5.6 Reflektivität der Kristalle

Bei der Behandlung der Reflexion von Röntgenstrahlung an ebenen Kristallen werden zwei Fälle unterschieden:

(i) Kristalle mit Mosaikstruktur

(ii) ideale Kristalle

Kristalle mit Mosaikstruktur setzen sich zusammen aus einer Vielzahl von kleinen Einzelkristallen. Für jeden einzelnen Kristallblock wird angenommen, daß er klein genug ist, um die Absorption der Strahlung darin zu vernachlässigen. Die einzelnen Blöcke sind unabhängig voneinander und ihre gegenseitige Verkippung führt zu der sogenannten Mosaikstruktur. Bei idealen Kristallen wird angenommen, daß keine Mosaikstruktur vorliegt. Die Berechnung der Reflexion an idealen Kristallen wird

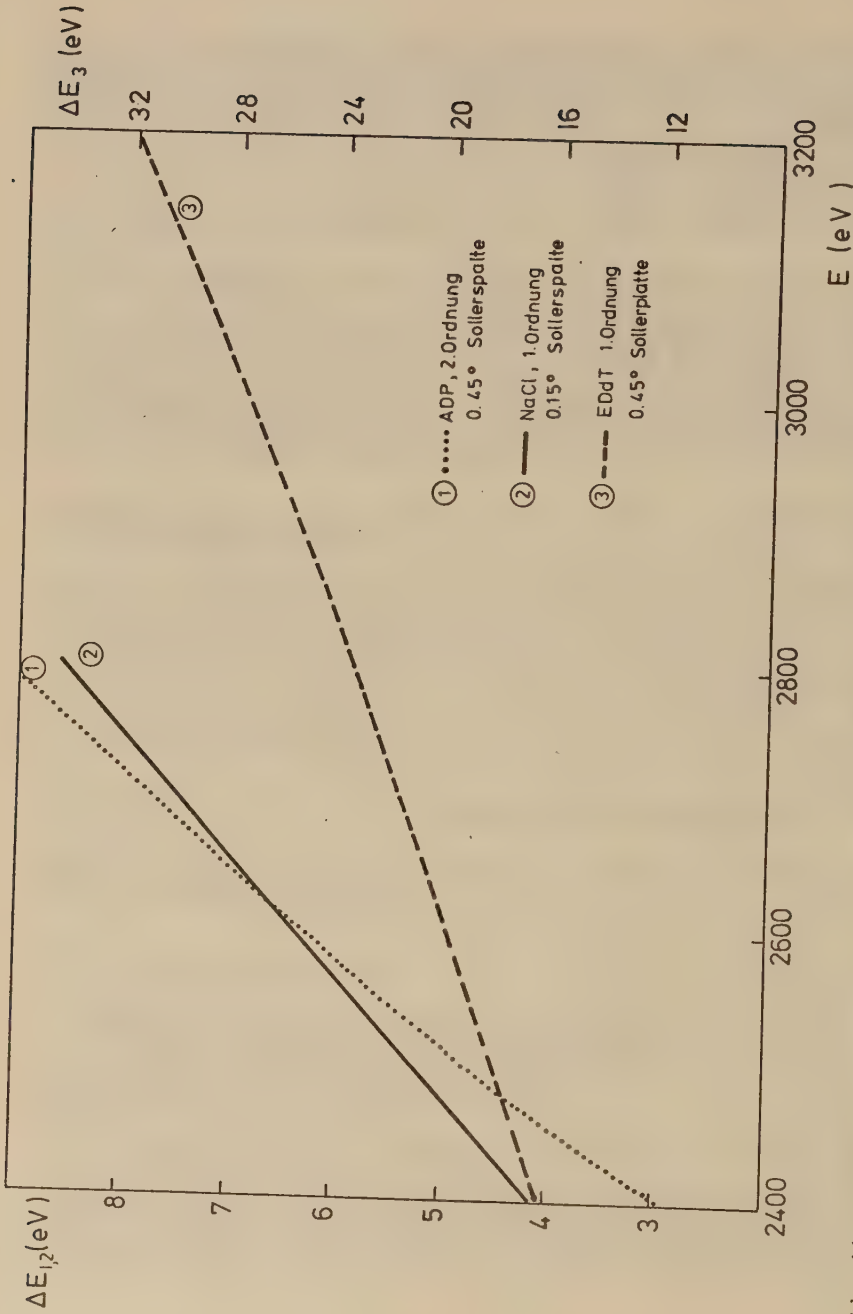


Abb. 11: Auflösungsvermögen ΔE des Spektrometers als Funktion der Röntgenenergie E

durch die Theorie von Darwin /8/ ermöglicht, der die Annahme zu Grunde liegt, daß die Absorption der Strahlung im Kristall vernachlässigt werden kann. Eine verbesserte Behandlung für dieses Problem liefert die Theorie von Prins /9/, die ausgehend von der Theorie von Darwin zusätzlich die Absorption der Strahlung im Kristall berücksichtigt. In der Praxis ist das Verhalten eines Kristalls abhängig von der Wellenlänge der reflektierten Strahlung. Je tiefer die Strahlung eindringt, desto mehr wird die Reflexion von der Theorie für Kristalle mit Mosaikstruktur beschrieben. Für die drei Modelle sind in Abbildung 12 Ergebnisse für die Reflektivität von ADP wiedergegeben. Die Rechnungen wurden von A. Burek durchgeführt. /10/

Im Experiment wurde Strahlung beobachtet, die in 2. Ordnung an einer (101)Ebene reflektiert wurde. Dies entspricht den Kurven (202) in dem Diagramm. Für die von uns beobachtete Strahlung waren Kristallwinkel zwischen 76° und 64° eingestellt. Aus den Kurven ergibt sich so über den gesamten Spektrumbereich eine Variation der Kristallreflektivität um etwa 30 %. Es ist also möglich, eine nahezu konstante Reflektivität im Spektrum anzunehmen und so aus der Beobachtung von Intensitäten der Röntgenlinien auf die Besetzung von einzelnen Zuständen zu schließen.

1.5.7 Nachweisempfindlichkeit des Spektrometers

Als charakteristische Größe für die Nachweiswahrscheinlichkeit von Röntgenquanten mit dem Kristallspektrometer läßt sich die Effizienz als effektiver Raumwinkel angeben, der folgende Verlustgrößen enthält:

- a) geometrischer Raumwinkel bestimmt durch den Abstand Target-Sollerspalt, den Abstand Sollerspalt-Kristall, Durchlaßfläche der Sollerspalt, Durchlaßwinkel der Sollerspalt
- b) Reflektivität des Analysatorkristalls
- c) evtl. Raumwinkelverkleinerung durch die Kollimatorplatten vor dem Proportionalzähler
- d) Absorption der Strahlung im Zählrohrfenster

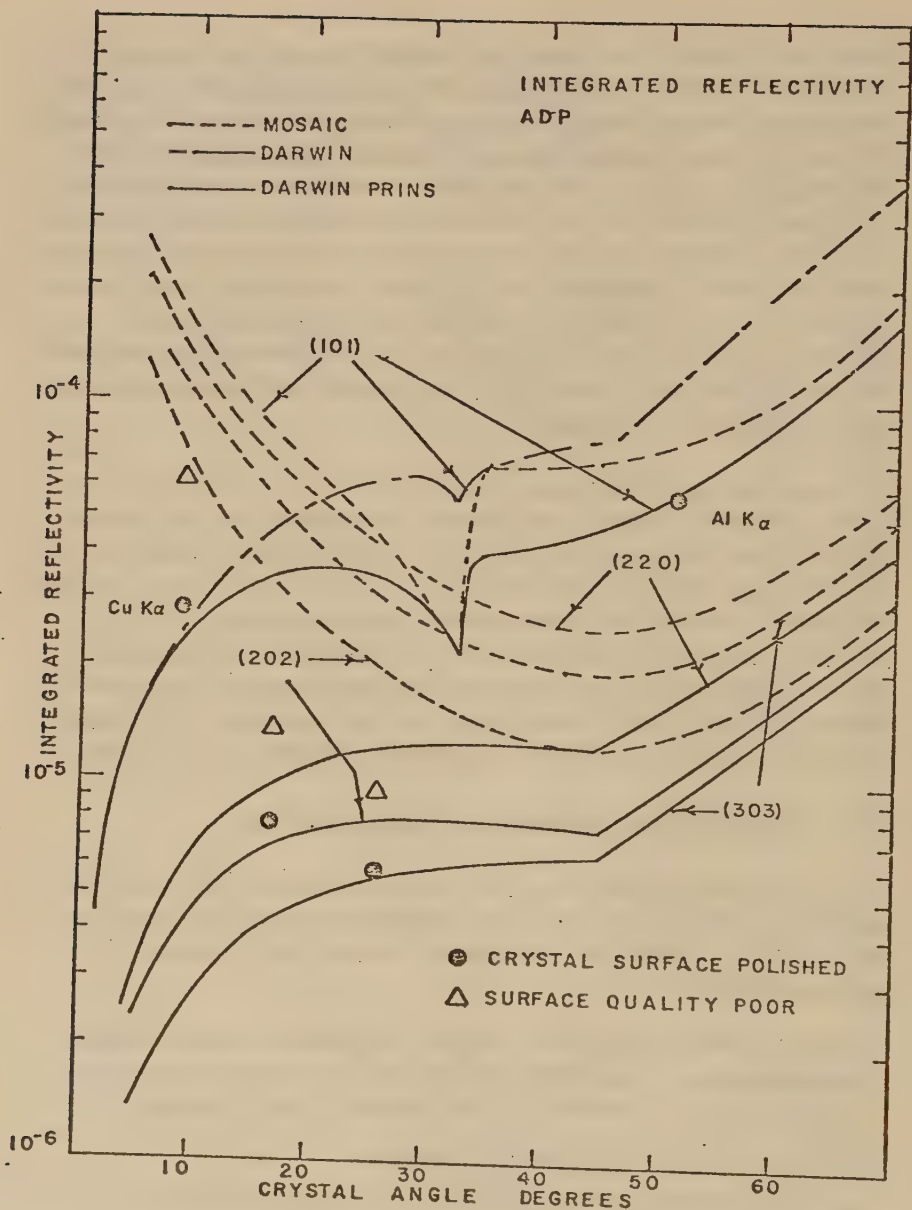


Abb. 12 Integrierte Reflektivität für ADP Analysatorkristall /10/

e) Nachweiswahrscheinlichkeit im Zähler

Die Größe dieses effektiven Raumwinkels läßt sich experimentell durch Vergleich der gemessenen Intensität im Spektrometerspektrum und im simultan akkumulierten Si(Li) Spektrum bestimmen. Die Nachweiswahrscheinlichkeit des Si(Li) Detektors ist im betrachteten Energiebereich von 2.4 bis 4 keV als 100 % anzusehen.

Für $E = 2.450 \text{ keV}$, 0.45° Sollerspalt, Reflexion in 2. Ordnung am ADP Kristall, 1° Kollimator vor dem Proportionalzähler, $6 \mu\text{m}$ Hostaphan-Fensterfolie, Abstand Kristallmitte - Ende Sollerspalt 60 mm, Abstand Target-Anfang Sollerspalt 450 mm ergibt sich für die Effizienz des Spektrometers ein effektiver Raumwinkel

$$\Omega_{\text{eff.}} = 5 \times 10^{-8} \text{ sr}$$

Auf Grund des Abstands zwischen Target und Sollerspalt und der Durchlaßfläche der Spalte erhält man für die Strahlung, die in das Spektrometer eintritt, einen geometrischen Raumwinkel

$$\Omega_{\text{geom.}} = 7 \times 10^{-4} \text{ sr}$$

Aus diesen beiden Werten läßt sich experimentell die Reflektivität P des ADP Kristalls für die untersuchte Strahlung bestimmen:

$$P = \frac{\Omega_{\text{eff.}}}{\Omega_{\text{geom.}}} = 7 \times 10^{-5}$$

Hierbei sind alle anderen Intensitätsverluste unberücksichtigt und in der Reflektivität mit enthalten. Extrapoliert man die Kurven von Burek in Abbildung 12, so erhält man als theoretische Reflektivität $P = 4 \times 10^{-5}$. Dies ist in guter Übereinstimmung mit dem experimentell bestimmten Wert.

2. Spektroskopie und Identifikation von Übergängen

Hinsichtlich der Drehimpulsquantenzahlen und der damit verbundenen Auswahlregeln verhält sich ein einzelnes Loch in einer sonst voll besetzten (abgeschlossenen) Schale wie ein einzelnes Elektron in einer sonst leeren Schale. In guter Näherung lassen sich daher Röntgenübergänge nach einer einfachen Ionisierung eines Atoms beschreiben wie strahlende Übergänge eines einzelnen Elektrons. Diese Beschreibung ist beim Auftreten von Mehrfachionisierung nicht möglich. Die resultierenden Drehimpulse der nicht abgeschlossenen Schalen geben Anlaß zu einer Vielzahl von möglichen Drehimpulskopplungen. Die daraus entstehenden verschiedenen möglichen Zustände unterscheiden sich energetisch auf Grund der resultierenden Elektron-Elektron Wechselwirkung. Diese Situation wird besonders deutlich, wenn auf Grund von hohen Wirkungsquerschnitten für die Ionisierung, z.B. in hochenergetischen Ionen, im Mittel nur noch wenige Elektronen vorhanden sind. Hier wird die theoretische Beschreibung der Übergänge die gleiche wie im Fall der optischen Spektroskopie äußerer Elektronen, nur liegt die Wellenlänge der emittierten Strahlung jetzt im Bereich der Röntgenstrahlung. Im Gegensatz zu der herkömmlichen charakteristischen Strahlung (K_{α_1} , K_{α_2} , ...) tritt hier eine wesentlich größere Anzahl von Röntgenübergängen auf.

Diese Zahl wird noch dadurch vergrößert, daß in einem Ionenstrahl üblicherweise eine Mischung von verschiedenen Mehrelektronensystemen vorliegt.

Allgemein ist zu erwarten, daß die beobachteten Röntgenlinien eine höhere Übergangsenergie zeigen, als im Fall der einfachen Ionisierung. Auf Grund der hohen Ionisierung der Atome wird die Abschirmung des Kernpotentials geringer. Dadurch steigt die Bindungsenergie der einzelnen Elektronen und führt so zu erhöhten Übergangsenergien.

2.1. Beobachtete Spektren

2.1.1 Messungen mit Si(Li) Detektoren

Mit Si(Li)-Röntgendetektoren ist für die Beobachtung von S(K) Strahlung eine Energieauflösung von optimal 140 eV erreichbar. /11/ Damit lassen sich in experimentellen Röntgenspektren, z. B. 90 MeV S auf $150 \mu\text{g}/\text{cm}^2$ C in Abbildung 13, innerhalb der $S(K_\alpha)$ Strahlung zwei Maxima trennen, analog in der $S(K_\beta)$ Strahlung. In dem abgebildeten Spektrum erkennt man die charakteristischen Eigenschaften eines Schwerionen-angeregten Röntgenspektrums:

- (i) sehr geringe Produktion von Projektilbremsstrahlung
- (ii) Auftreten von nichtcharakteristischer Strahlung in Folge des strahlenden Elektroneneinfangs (REC) /12/
- (iii) Kontinuumsstrahlung auf Grund von Übergängen in kurzzeitig ausgebildeten Quasimolekülen (MO-Strahlung) /13/

zu (ii):

Im Gegensatz zum nichtstrahlenden Elektroneneinfang ist der Prozeß des strahlenden Elektroneneinfangs REC (Radiative Electron Capture) bei den vorliegenden Ionengeschwindigkeiten ein seltener Prozeß, dessen Wirkungsquerschnitt im allgemeinen kleiner als 10^{-21} cm^2 ist.

Der Mechanismus für den REC kann wie folgt illustriert werden, Abbildung 14a: In einem Stoß zwischen einem Projektil der Geschwindigkeit v und einem Targetatom wird ein Targetelektron der Orbitalgeschwindigkeit v_e in ein bereits vorhandenes Loch einer inneren Schale des Projektils eingefangen. Dabei wird ein Photon der Energie $E_{\text{REC}} = E_B + E_K$ emittiert. E_B ist die Bindungsenergie des Elektrons nach dem Einfang und E_K die kinetische Energie eines Elektrons mit der Projektilgeschwindigkeit v . Dies bedeutet, daß die Energie der REC Strahlung stets größer ist als die charakteristische Röntgenstrahlung,

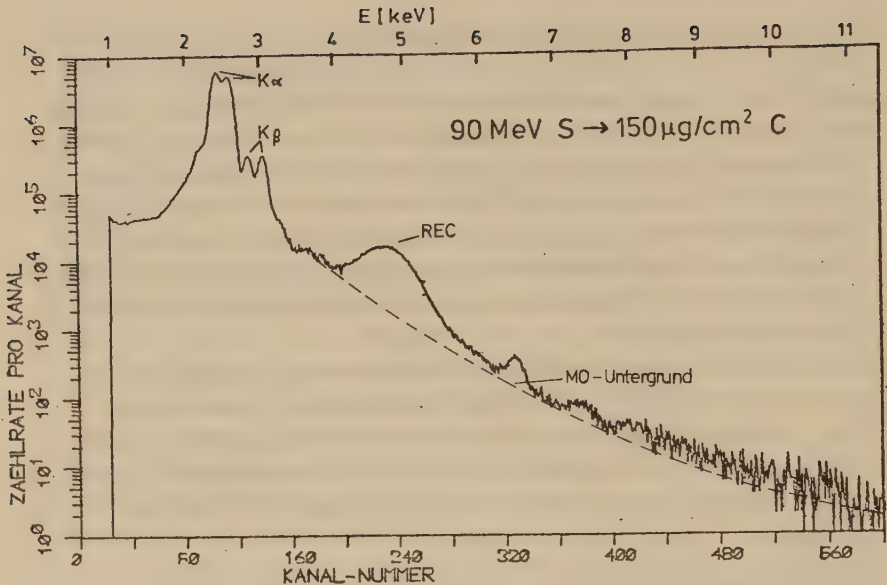


Abb. 13: Röntgenspektrum für den Beschuß von 150 $\mu\text{g}/\text{cm}^2$ C mit 90 MeV S Ionen (Si(Li) Detektor)

die zu der Lochkonfiguration des Projektils gehört. Dies ist anschaulich einzusehen: Für einen Beobachter im Bezugssystem des Projektils hat ein Elektron im Kontinuum die Energie E_B und zusätzlich wegen der Bewegung des Projektils in Bezug auf das ruhende Target die Energie $E_K = \frac{1}{2} mv^2$. Für den Fall, daß ein Elektron eingefangen wird, das ursprünglich eine scharfe Energie hatte, würde eine scharfe REC Strahlung beobachtet werden. Die Targetelektronen zeigen jedoch sowohl als Leitungselektronen als auch als gebundene Elektronen eine Geschwindigkeitsverteilung, die sich in der Breite der REC Strahlung widerspiegelt. Damit ist es theoretisch möglich, aus der Breite der REC-Verteilungen die Impulsverteilungen von Targetelektronen zu bestimmen /12, 14, 15/.

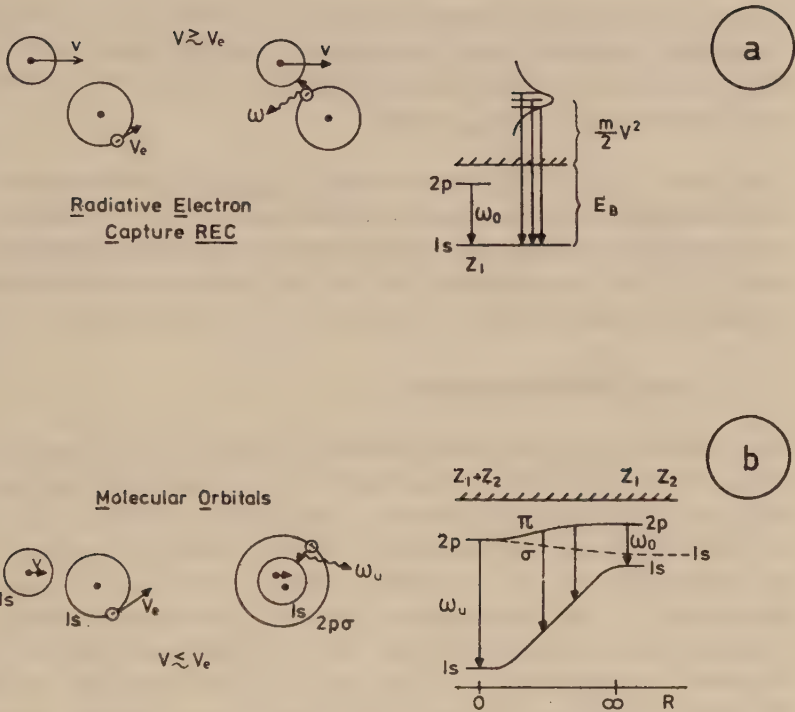


Abb. 14: Prinzip des strahlenden Elektroneneinfangs, REC(a) und der Molekülorbital-Strahlung, MO (b)

zu (iii):

In Stößen mit einer Stoßgeschwindigkeit v klein gegenüber der Orbitalgeschwindigkeit v_e der Elektronen, kann die Zeit ausreichen, daß die Elektronen sich während des Stoßes adiabatisch umstellen und in Molekülorbitalen anordnen, Abbildung 14b. Für jeden internuklearen Abstand R können dann Termdiagramme für die Energieniveaus berechnet werden. Bei jedem Abstand können Übergänge von Elektronen dieses Systems in innere Zustände geschehen, wenn entweder ein Loch in dieses System eingebracht wurde oder wenn in dem betrachteten Stoß gleichzeitig ein Loch in einer inneren Schale produziert wird /13,16/.

In den beobachteten Spektren reicht die Strahlung, die solchen Übergängen innerhalb des Quasimoleküls zugeschrieben wird, weit über die Energie der charakteristischen Strahlung des vereinigten Atoms mit $Z_U = Z_1 + Z_2$ hinaus.

Dies kann in einer einfachen Betrachtung unter Berücksichtigung der Stoßverbreiterung verstanden werden: Das Quasimolekül hat nur eine sehr kurze Lebensdauer in der Größenordnung von 10^{-18} sec. Diese kurze Zeit hat auf Grund der Unschärfere-lation eine Energiebreite im Bereich von keV zur Folge. /17/

2.1.2 Spektrometermessungen

Eine Untersuchung der S(K)Strahlung mit dem Kristallspektrometer bringt bereits mit dem EDdT Kristall und 0.45° Soller-spalten eine deutliche Trennung der Maxima aus den Si(Li) Spek-tren. Es sind zwei getrennte K_α Linien zu erkennen und die K_β Strahlung wird in 5 getrennte Linien aufgespalten. (Siehe Abbildung 15). Bei verbesserter Auflösung des Spektrometers lassen sich in den Spektren mit ADP als Analysatorkristall, bzw. mit NaCl, (Abbildungen 16, 17) die 2 K_α Linien weiter trennen: Es werden Linien der Energie 2410.1 eV, eine breitere Linien-gruppe von 2423.5 eV, 2428.4 eV und 2432.3 eV, die nicht aufge-löst ist, dann Linien von 2441.2 eV, 2454.2 eV sowie von 2566.5, 2589.5 und 2614.5 eV beobachtet. Auf Grund der Eichung des Spektrometers beträgt der Fehler der Linienenergie ± 1 eV.

2.2 Identifikation von Übergängen

2.2.1 Korrektur der Dopplerverschiebung

Der experimentelle Aufbau des Spektrometers erlaubt nur die Festlegung des Beobachtungswinkels auf $90^\circ \pm 1^\circ$. Die hieraus resultierende Unsicherheit in der Bestimmung der emittierten Energie einer beobachteten Übergangsenergie von 2450 eV be-trägt ± 4.4 eV.

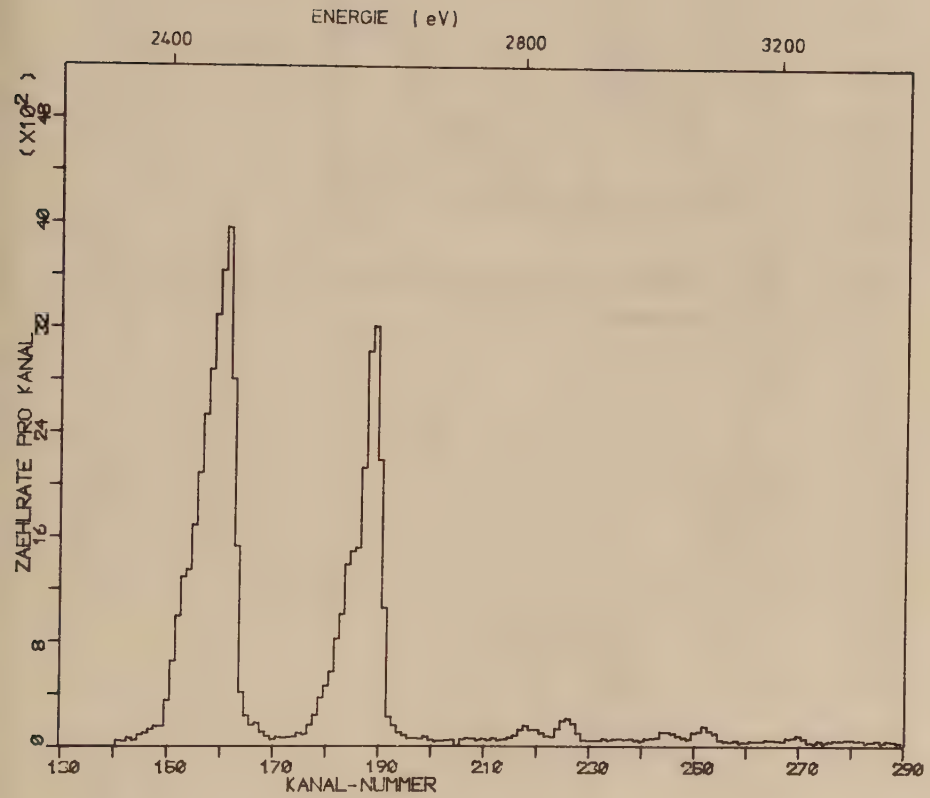


Abb. 15: S(K) Röntgenspektrum für 92 MeV S auf $150 \mu\text{g}/\text{cm}^2$ C.
EDdT Analysatorkristall

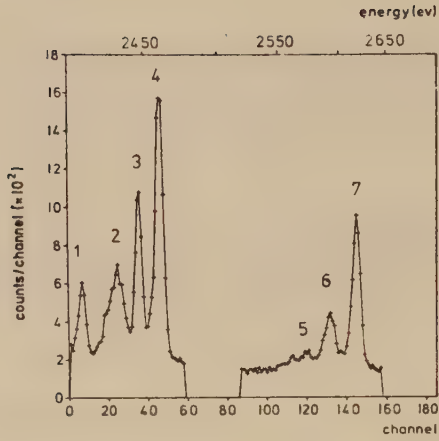


Abb. 16: S(K) Röntgenspektrum für 92 MeV S auf 150 $\mu\text{g}/\text{cm}^2$ C ADP Analysatorkristall

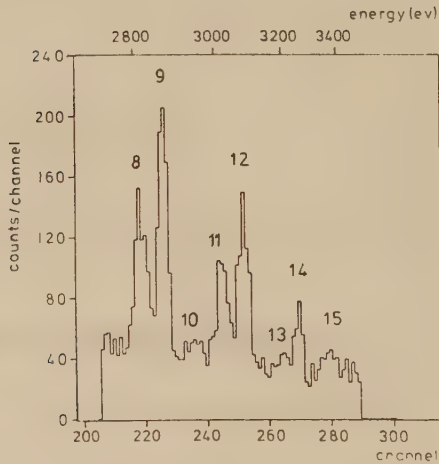


Abb. 15a: Ausschnitt aus Abb. 15, EDdT Kristall

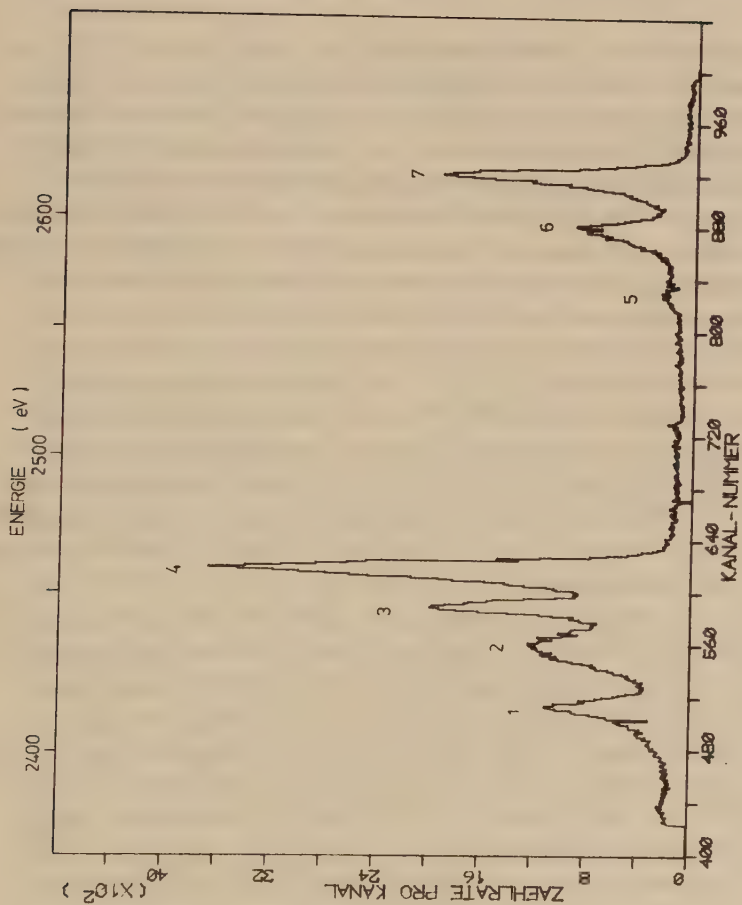


Abb. 17: S(K) Röntgenspektrum für 92 MeV S auf $150 \mu\text{g}/\text{cm}^2\text{C}$
NaCl Analysatorkristall

Um einen geringeren Fehler der Übergangsenergien zu erhalten, wird versucht, durch Vergleich von theoretischen und experimentellen Übergangsenergien eine Linie zu identifizieren (siehe 1.5.3). Aus dem Verhältnis der theoretischen und der beobachteten Übergangsenergie kann man dann nach der Formel für die Doppler-Verschiebung den genauen Beobachtungswinkel bestimmen.

Aus der beobachteten Übergangsenergie der Linie 6 von 2614.5 eV erhält man eine emittierte Energie von 2622.5 ± 4.5 eV. Dieser Wert liegt sehr nahe bei dem theoretischen Wert für den Übergang $(2p)^2P - (1s)^2S$ von 2621.63 eV /18/, einem Übergang in Wasserstoff-ähnlichem Schwefel ohne äußere 'spectator' Elektronen. Die Übergangsenergie ist durch Mittelung unter Annahme statistischer Besetzung erhalten. Die Anwesenheit eines weiteren L Elektrons kann mit einer Energieverschiebung von etwa 25 eV ausgeschlossen werden. Die zusätzliche Gegenwart eines M Elektrons mit einer Verschiebung der Übergangsenergie von 6.9 eV ist auf Grund des Verhältnisses σ^I/σ^A von Ionisierungsquerschnitt σ^I zu Einfangquerschnitt σ^C von 10^4 ebenso auszuschließen: Die Gegenwart von Elektronen in weiter äußeren Schalen ist bei Projektilenergien von fast 100 MeV sehr unwahrscheinlich. Untersuchung der Gleichgewichtsbesetzungen von (2p) und (3p) Zuständen zeigt bereits einen Faktor 10 weniger wasserstoffähnliche Schwefelionen im Zustand (3p). (Siehe auch 4.1.) Unter der Annahme gleicher Bedingungen für He-ähnliche Zustände ist die Behauptung gerechtfertigt, daß der Übergang mit einer beobachteten Energie von 2614.5 eV als Übergang $(2p)^2P - (1s)^2S$ identifiziert wird, ohne daß äußere 'spectator' Elektronen vorhanden sind. Mit dieser Voraussetzung erhält man als Beobachtungswinkel $\alpha = 89.73^\circ$. Bei dieser Berechnung ist der Energieverlust der Schwefelionen im Target nicht berücksichtigt, d.h. es wird angenommen, daß die beobachtete Röntgenstrahlung von einem Ion emittiert wird, dessen kinetische Energie 92 MeV beträgt. Bei maximalem Energieverlust, d.h. bei Emission der Strahlung auf der Rückseite des Targets erhält man bei dem dicksten verwendeten Aluminiumtarget ($370 \mu\text{g}/\text{cm}^2$ unter 45° gestellt) eine Verschiebung der beobachteten Übergangsenergie von weniger als 1 eV. Da die Be-

stimmung der Übergangsenergien bei kleinen Targetdicken erfolgt, kann der Beitrag des Energieverlusts vernachlässigt werden.

Unter Verwendung des Beobachtungswinkels α können aus den anderen beobachteten Übergangsenergien die emittierten Übergangsenergien bestimmt werden. Der Fehler der Übergangsenergie ist dann weiterhin durch den Fehler der Absoluteichung gegeben. (Siehe Tabelle 1)

2.2.2 Hartree - Fock Rechnungen

Zur Berechnung von Energien von Elektronenkonfigurationen sind 2 verschiedene Computerprogramme für Hartree-Fock Rechnungen verwendet worden:

- (i) ein nichtrelativistisches Programm von C. Froese Fischer /19/
- (ii) ein voll relativistisches Programm von J.P. Desclaux /20/, das zur Lösung von der Dirac Gleichung ausgeht (Dirac-Fock Programm)

zu (i): Das Programm von Froese Fischer

Grundvoraussetzung ist hier die Möglichkeit, daß die Gesamtwellenfunktion Ψ (SL) eines Zustands in einem Atom mit N Elektronen dargestellt werden kann als

$$\Psi(SL) = \sum_{j=1}^{NCFG} c_j \Phi_j(n_1 \ell_1, n_2 \ell_2, \dots, n_N \ell_N, SL)$$

Hierbei ist NCFG die Zahl der Konfigurationen zu einer Elektronenbesetzung, Φ_j eine Eigenfunktion von S^2 und L^2 für eine gegebene Konfiguration j mit der Bedingung $\langle \Phi_i | \Phi_j \rangle = \delta_{ij}$. Die Koeffizienten c_j geben die Wichtung der einzelnen Konfigurationen in der Berechnung von Ψ . Mit $E_{ij} = \langle \Phi_i | H | \Phi_j \rangle$, H ist der nichtrelativistische Hamiltonoperator, erhält man dann

$$E_{TOTAL}(SL) = \sum_{i=1}^{NCFG} \sum_{j=1}^{NCFG} c_i c_j E_{ij} / \left(\sum_{i=1}^{NCFG} c_i^2 \right)$$

Bei Hartree - Fock Rechnungen wird angenommen, daß die Wellenfunktion einer Konfiguration eine Determinanten-Wellenfunktion

ist, die aus Einelektronenwellenfunktionen ϕ_i aufgebaut ist. Stellt man die ϕ_i in der Form dar

$$\phi_i = \frac{1}{r} P(n_i, l_i, r) Y_{l_i}^{m_{l_i}}(\theta, \phi) \chi(\frac{1}{2}, m_{s_i})$$

d.h. als Produkt von Radial-, Azimuthal- und Spinfunktion, dann ist die totale Energie nur von der Radialfunktion P abhängig.

In dem Programm werden die Koeffizienten c_j , $j = 1 \dots \text{NCFG}$ und die Radialfunktionen $P(n_i, l_i, r)$, $i = 1 \dots \text{NWF}$ mit NWF der Anzahl der Wellenfunktionen für jede Konfiguration berechnet. Bedingung bei der Berechnung ist die Stationarität von E_{TOTAL} bei Variation der c_j und der Radialfunktionen.

Das Multikonfigurations Hartree - Fock Programm löst dies Problem, indem wiederholt folgende beiden Fälle gelöst werden:

- (a) gegeben die Koeffizienten c_j , $j = 1 \dots \text{NCFG}$, werden die Radialfunktionen $P(n_l, r)$ für stationäre Energie berechnet.
- b) Gegeben die Radialfunktion $P(n_l, r)$ werden neue Koeffizienten c_j für stationäre Energie berechnet.

Der Fall (a) ist ein self consistent field Problem mit zusätzlichen Termen durch die Konfigurationswechselwirkung. Der Fall (b) ist ein Eigenwertproblem mit E_{TOTAL} als Eigenwert der Matrix E_{ij} und c_{ij} als Eigenvektor.

zu (ii) Das Dirac-Fock Programm von Desclaux

Dieses Programm ist vom Prinzip her eine relativistische Fassung des Programms von C. Froese Fischer. Die Gesamtwellenfunktion für einen gebundenen Zustand eines Atoms mit N-Atomen lautet hier

$$\Psi = \sum_{\nu=1}^{\text{NCFG}} W_{\nu} \Phi^{\nu}(1, 2, \dots, N, J, J_z)$$

Die Wellenfunktionen Φ^{ν} sind jetzt Eigenfunktionen des Gesamtdrehimpulses J und seiner Projektion J_z . Im relativistischen Fall sind die Wellenfunktionen nicht mehr gleichzeitig

Eigenfunktion von Bahn- und Spin-Drehimpuls, da die Spin-Bahn Wechselwirkung explizit im Dirac'schen Hamiltonoperator eingeführt ist. Jede Wellenfunktion Φ^v ist eine Determinantenfunktion aufgebaut aus Eielektronenfunktionen ϕ .

Die Funktionen ϕ sind Spinoren der Form

$$\phi_{n\kappa}(\tau) = \frac{1}{r} \begin{pmatrix} P_{n\kappa}(\tau) X_{\ell,m}(\theta, \varphi) \\ i Q_{n\kappa}(\tau) X_{\bar{\ell},m}(\theta, \varphi) \end{pmatrix}$$

mit P und Q der großen bzw. der kleinen Komponente. n ist die Hauptquantenzahl des jeweiligen Elektrons. κ ist definiert als

$$\kappa = \begin{matrix} 1 & \text{für } j = l - 1/2 \\ -(l+1) & \text{für } j = l + 1/2 \end{matrix}$$

mit l dem Bahndrehimpuls und j dem Gesamtdrehimpuls des Elektrons. $\bar{l}$ ist definiert als

$$\bar{l} = l - 1/2 \quad \text{für } j = l - 1/2$$

Die in den Eielektronenfunktionen auftretenden Funktionen X sind die Spin-Bahn Eigenfunktionen. Die totale Energie, die zu einer Gesamtwellenfunktion Ψ gehört, ist analog zu dem Froese Fischer Programm gegeben als

$$E_{TOTAL} = \sum_{\nu, \mu} W_{\nu} W_{\mu} \langle \Phi^{\nu} | H | \Phi^{\mu} \rangle / \sum_{\nu} W_{\nu}^2$$

Hierbei ist H der relativistische Hamiltonoperator, in dem die Elektron-Elektron Wechselwirkung in Form der elektrostatischen und der Breit-Wechselwirkung mitgenommen ist. /21/

Die Dirac-Fock Gleichungen erhält man durch die Bedingung der Stationarität der totalen Energie. Die Lösung des Problems erfolgt analog zum nichtrelativistischen Fall: Mit einem Satz

Koeffizienten W wird die totale Energie in Bezug auf die Radialfunktionen P und Q minimalisiert. Mit den so gewonnenen Funktionen werden dann neue Koeffizienten W berechnet. Dieses Verfahren wird wiederholt, bis die totale Energie innerhalb von vorgegebenen Schranken konstant bleibt. Die nichtrelativistische mittlere Energie einer Elektronenkonfiguration ist in der Näherung der LS-Kopplung

$$E_{\text{aver}}^{\text{NR}} = \frac{\sum_{L,S} (2L+1)(2S+1) E(L,S)}{\sum_{L,S} (2L+1)(2S+1)}$$

mit $E(L,S)$ der Energie eines Multiplettzustandes. Für relativistische Rechnungen in der Näherung der jj -Kopplung ist die mittlere Energie einer Konfiguration gegeben als

$$E_{\text{aver}}^{\text{R}} = \frac{\sum_j (2j+1) E(j,j)}{\sum_j (2j+1)}$$

Hierbei ist $E(j,j)$ die Energie eines Multiplettzustandes in jj -Kopplungsnaheerung.

Für die Berechnung der Energie eines einzelnen Multiplettzustandes werden zwei verschiedene Grenzfälle als Näherungen verwendet:

- (i) Wenn die Spin-Bahn Wechselwirkung und dadurch die Feinstruktur wesentlich kleiner ist als die elektrostatische Coulombwechselwirkung zwischen 2 Elektronen, nimmt man an, daß mit einem Vektormodell des Atoms in LS-Kopplung eine gute Näherung gegeben wird. In dieser Beschreibung kommutieren sowohl L^2 als auch S^2 mit dem Operator der elektrostatischen Coulombwechselwirkung. Die Spin-Bahn Wechselwirkung wird als kleine Störung betrachtet. /22/
- (ii) In den Fällen, in denen die Spin-Bahn Wechselwirkung groß gegenüber der elektrostatischen Wechselwirkung ist, verlieren die Begriffe Bahndrehimpuls und Spindrehimpuls eines Elektrons ihren Sinn. Einzige relevante Größe ist hier der Gesamtdrehimpuls j eines Elektrons. In der Näherung der jj -Kopplung wird die elektrostatische

Wechselwirkung als kleine Störung betrachtet. Die Größe der Spin-Bahn Wechselwirkung nimmt mit steigender Kernladung Z des betrachteten Atoms zu. Wenn beide Wechselwirkungen von gleicher Größenordnung sind, ist keine der beiden Näherungen eine gute Beschreibung. Hier spricht man von intermediärer Kopplung. /22/

Beide verwendeten Rechenprogramme drucken als Ergebnis der Rechnung die jeweilige E_{average} , die mittlere Energie aller Multiplettzustände der gegebenen Elektronenkonfiguration aus. Außerdem werden die Werte der Slater'schen F^k und G^k Integrale angegeben, die für die Berechnung der einzelnen Multiplettenergien benötigt werden. /23/

Unter Verwendung der Werte für E_{aver} , für die direkten Integrale F^k und für die Austauschintegrale G^k aus den Programmen wurden die Energien einzelner Multiplettzustände berechnet. Als Kopplung wurde die Näherung der LS-Kopplung verwendet. Die für die Bestimmung der Multiplettenergien notwendigen Koeffizienten der F und G Integrale wurden dem Buch von Slater entnommen. /23/ B. Fricke hat Rechnungen mit Hilfe des Programms von J.P. Desclaux durchgeführt, wobei er die Multiplettenergien in der Näherung der jj Kopplung mit Multikonfigurationswechselwirkung (MCF) berechnet hat. /24/ Manche Zustände in der Terminologie der jj Kopplung lassen sich direkt in die Terminologie der LS-Kopplung überführen. So ist z.B. im He-ähnlichen 2 Elektrensystem der Zustand $(0, 1/2; 1, 1/2)_O$ mit $(1j_1, 1j_2)_J$ identisch mit dem Zustand $(1s2p)^3P_O$ in der LS Kopplungsnäherung. Analog gilt die Identität für $(0, 1/2; 1, 3/2)_2$ mit $(1s2p)^3P_2$.

Bei Rechnungen mit dem Programm von Froese Fischer ist zu beachten, daß dieses Programm nicht-relativistische Energien liefert. Für einen Vergleich mit experimentellen Übergangsenergien und mit den Werten von B. Fricke müssen die Energien relativistisch korrigiert werden.

Die Korrekturen bestehen aus 3 Beiträgen /25/:

$$\Delta E = \Delta E_m + \Delta E_{\text{Dar}} + \Delta E_{\text{so}}$$

Hierbei ist ΔE_m die Korrektur für die relativistische Massenänderung des Elektrons. Unter der Näherung von Wasserstoff Wellenfunktionen ist

$$\Delta E_m (n_i, l_i) = - \frac{\alpha^2 Z^4}{2 n_i^3} \left(\frac{1}{l_i + 1/2} - \frac{3}{4 n_i} \right)$$

Für den sogenannten Darwin Term erhält man in der Näherung von Wasserstoff-Wellenfunktionen

$$\Delta E_{Dar} (n_i, l_i) = \begin{matrix} + \frac{\alpha^2 Z^2}{2 n_i^3} & \text{für } l_i = 0 \\ 0 & \text{für } l_i \neq 0 \end{matrix}$$

Zu beachten ist, daß der Darwin Term und die Massenkorrektur entgegengesetzte Vorzeichen haben.

Der dritte Korrekturbeitrag ΔE_{SO} beschreibt die Spin-Bahn Aufspaltung. In der Näherung von Wasserstoff-Wellenfunktionen erhält man hier:

$$\Delta E_{SO} (n_i, l_i) = \begin{matrix} \frac{1}{2} A [j_i(j_i + 1) - l_i(l_i + 1) - s_i(s_i - 1)] & \text{für } l_i \neq 0 \\ 0 & \text{für } l_i = 0 \end{matrix}$$

$$\text{mit} \quad A = \frac{1}{2} \frac{\alpha^2 (Z-3)(Z-1)^3}{n_i^3 (2l_i + 1)(l_i + 1)l_i}$$

und den beiden Möglichkeiten

$$j = \begin{matrix} 1 + 1/2 \\ 1 - 1/2 \end{matrix}$$

Eine Zusammenstellung der so erhaltenen Übergangsenergien und ein Vergleich mit Werten von Fricke und den experimentellen Ergebnissen ist in Tabelle 1 gegeben.

Die Übereinstimmung von theoretischen und experimentellen Werten ist gut. Die in der Näherung der LS-Kopplung ohne MCF und

	Exper.	Theor.		Theor.
		(LS-Koppl.)	(jj-Koppl.+MCF)	Dirac
1	$(1s2p)^2_4P - (1s^22p)^2_2P$ $(1s2s2p)^4P - (1s^22s)^2_2S$	2416.6	2419.1	2416.6
2	$(1s2p)^2_2D - (1s^22p)^2_2P$ $(1s2p)^2_2P - (1s^22p)^2_2P$ $(1s2p2s)^2P - (1s^22s)^2_2S$	2434.9 2438.9	2433.8 2437.4	2415.7 2431.3 2435.1 2436.7
3	$(1s2p)^3_3P - (1s^2)^1_1S$	2447.8	2447.7	2447.3
4	$(1s2p)^1_1P - (1s^2)^1_1S$	2460.8	2460.7	2460.2
5	$(2p)^3_3 - (1s2p^2)$	2573.5	2573.6	
6	$(2p)^2_3P - (1s2p)^3_3P$	2596.5	2596.7	
7	$(2p)^2_2P - (1s)^2_2S$	2621.6		2621.6
8	$(1s2p3p) - (1s^22p)$	2824.8	2825.6	
9	$(1s3p) - (1s^2)$	2879.8	2881.4	
10	$(1s2p4p) - (1s^22p)$ $(1s4p) - (1s^2)$	2955. 3042.3	2957.2 3031.5	
11				
12	$(2p3p) - (1s2p)$		3047.9	
13	$(3p) - (1s)$	3103.9		3106.3
14	$(2p4p) - (1s2p)$	3201.	3199.1	
15	$(4p) - (1s)$ $(5p) - (1s)$ $(6p) - (1s)$	3278.6 3369.9		3275.9 3354.5 3397.1

Tab.1 Vergleich von experimentellen und theoretischen Übergangsenergien

die in jj-Kopplung mit MCF gerechneten Energien stimmen ebenfalls gut überein.

2.2.3 Beobachtung der Strahlung von Übergängen mit $\Delta S \neq 0$

In Tabelle 1 fällt auf, daß Übergänge identifiziert worden sind, die in der Näherung der LS-Kopplung verboten sind. Dabei sind Spin-flip Übergänge ($\Delta S \neq 0$) verboten und die zugehörigen Zustände sind demzufolge metastabil. Dies gilt zum Beispiel für den Übergang $(1s2p)^3P - (1s^2)^1S$, der unter Berücksichtigung der Spin-Bahn Wechselwirkung in 3 Übergänge, unterschieden durch den Gesamtdrehimpuls des Ausgangszustands, zerfällt:
 $(1s2p)^3P_{0,1,2} - (1s^2)^1S_0$. Für den Übergang $(1s2p)^3P_2 - (1s^2)^1S_0$ gilt zusätzlich, daß er wegen $\Delta J = 2$ nicht als E1 Übergang unter Emission von Röntgenstrahlung zerfallen kann. Die Bedingung für erlaubte E1 Übergänge ist $\Delta J = 0, \pm 1$. Für den 3P_2 Zustand ist sowohl ein M2 Übergang in 1S_0 Grundzustand als auch ein E1 Übergang $(1s2p)^3P_2 - (1s2s)^3P_1$ erlaubt. Cocke et al. haben als Lebensdauer für den Übergang $(1s2p)^3P_2 - (1s^2)^1S_0$ eine Lebensdauer von 2.5 nsec gemessen /26/. Für den Übergang $(1s2p)^3P_0 - (1s^2)^1S_0$ gilt zusätzlich zum $\Delta S \neq 0$ das Verbot von Übergängen zwischen $J = 0$ als Anfangszustand und $J = 0$ als Endzustand. Für diesen Übergang sind alle 1 Photonenzerfälle jeglicher Multipolarität verboten. Nach Schmieder /27/ sind für diesen Übergang nur multi-Photonenzerfälle mit ungerader Parität möglich. Voraussetzung hierfür ist die Abwesenheit von Hyperfeinwechselwirkung. Für Schwefel mit $I = 0$ ist diese Bedingung gegeben.

Für den Übergang $(1s2p)^3P_1 - (1s^2)^1S_0$ gilt nur der Verstoß gegen die $\Delta S = 0$ Bedingung. Demzufolge ist für diesen Übergang die kürzeste Lebensdauer der drei Zustände zu erwarten. Cocke et al. /26/, sprechen hier sogar im Vergleich zu den beiden anderen Übergängen von einem prompten Zerfall in den 1S_0 Zustand. Dieser relativ schnelle Übergang wird durch die Spin-Bahn Wechselwirkung bewirkt. Hierbei mischen der $(1s2p)^1P_1$ und der $(1s2p)^3P_1$ Zustand. /28/ Die Lebensdauer für diesen Übergang läßt sich durch Extrapolation bestimmen: Mit einer Z^{-10} Abhän-

gigkeit nach Elton /29/ erhält man aus Werten von Drake und Dalgarno /30/ eine Lebensdauer von 1.6×10^{-12} sec für den Übergang $(1s2p)^3P_1 - (1s^2)^1P_0$ in Schwefel.

Bei den Übergängen $(1s2p^2)^4P - (1s^22p)^2P$ und $(1s2s2p)^4P - (1s^22s)^2S$ ist ebenfalls $\Delta S \neq 0$. Bei diesen Übergängen erhält man unter Berücksichtigung der Spin-Bahn Wechselwirkung eine Aufspaltung der Ausgangszustände in die Multiplettzustände $^4P_{1/2}, ^4P_{3/2}, ^4P_{5/2}$. Für die Endzustände ergibt dies eine Aufspaltung in $^2P_{3/2}$ und $^2P_{1/2}$ Multipletts. Hier werden die Anfangszustände mit $J = 3/2$ und $J = 1/2$ mit den Endzuständen mit gleichen J mischen und so zu kürzeren Lebensdauern führen. Rechnungen von Bhalla ergeben für alle Übergänge dieser Zustände eine Lebensdauer im Bereich von 10^{-12} sec. Lediglich für den $(1s2s2p)^4P_{5/2} - (1s^22s)^2P_{1/2}$ Übergang gibt er eine theoretische Lebensdauer von .9 ns an. /31/

Eine Beobachtung von Übergängen mit einer Lebensdauer im Bereich von 10^{-9} sec ist aus apparativen Gründen auszuschließen: Die Breite der Sollerspalte beträgt 16 mm. Legt man eine optimale Justierung zu Grunde, bedeutet dies eine Beobachtungsstrecke bis zu 8 mm hinter dem Target. Das bedeutet, daß Strahlung in das Spektrometer gelangen kann, die im Bereich 8 mm vor dem Target bis 8 mm hinter dem Target emittiert wird. Die 8 mm Sichtweite hinter der Folie entsprechen bei Schwefelionen von 92 MeV einer Flugzeit des Projektils von 0.3×10^{-9} sec. Strahlung, die vor dem Target emittiert wird, kann nur von Anregungen des Projektils an Strahlbegrenzungsblenden stammen. Der Abstand der letzten Blende, auf der Strahlstrom gemessen wird, beträgt 170 mm zum Target. Dies entspricht einer Flugzeit von 7.3 ns für 92 MeV S Ionen. Auf Grund dieser apparativen Verhältnisse kann angenommen werden, daß die beobachteten Linien im wesentlichen den Übergängen $(1s2p)^3P_1 - (1s^2)^1P_1$ und $(1s2p^2)^4P_{1/2,3/2} - (1s^22p)^2P_{1/2,1/2}$ bzw. $(1s2s2p)^4P_{1/2,3/2} - (1s^22s)^2S_{1/2,3/2}$ zugeordnet werden müssen.

2.2.4 Diskussion des Abstands $^3P-^1P$

Der energetische Abstand der beobachteten Übergänge $(1s2p)^3P - (1s^2)^1S$ und $(1s2p)^1P - (1s^2)^1S$ ist gut geeignet, um einen Vergleich zwischen experimentellen Werten und theoretischen Rechnungen durchzuführen.

Im Experiment wird für Aluminium Targets eine Verringerung des Abstands der beiden Linien von 13.2 eV für eine Targetdicke von $45 \mu\text{g}/\text{cm}^2$ bis zu 12.1 eV für eine Targetdicke von $523 \mu\text{g}/\text{cm}^2$ beobachtet. Diese Veränderung kann durch den Einfluß des Energieverlusts der Ionen erklärt werden. Durch den steigenden Energieverlust bei zunehmender Targetdicke nimmt die Projektilgeschwindigkeit ab. Die bisherige Dopplerkorrektur der beobachteten Spektren für eine Emission in einem S Projektil mit 92 MeV wird dadurch falsch. Betrachtet man zwei Linien, die beide zu Übergängen mit etwa gleicher Lebensdauer gehören, würde die Differenz beider Übergangsenergien nicht verändert werden. Es würde lediglich eine Verschiebung beider Linien beobachtet werden.

Bei der Differenz $^3P-^1P$ ist jedoch zu berücksichtigen, daß der Übergang $(1s2p)^3P - (1s^2)^1S$ kein prompter Übergang ist, und im Vergleich zu dem Übergang $(1s2p)^1P - (1s^2)^1S$ eine etwa 100 fach größere Lebensdauer hat. Die Emission der Strahlung des $^3P-^1S$ Übergangs erfolgt völlig außerhalb des Targets. Das bedeutet, daß das Ion bereits den maximalen Energieverlust erlitten hat. Die Strahlung des prompten Übergangs $^1P - ^1S$ wird jedoch sowohl innerhalb des Targets als auch außerhalb des Targets emittiert. Das Verhältnis der Anteile, die innen und außen abgestrahlt werden, variiert von 1:2 bei dem dünnsten Target bis zu 4.8 : 1 bei dem dicksten Target. Korrigiert man die experimentellen Übergangsenergien für den Energieverlust der Projektilionen mit Werten von Northcliffe und Shilling /32/ und interpoliert auf den Fall ohne Energieverlust (siehe Abbildung 18), erhält man als Differenz der beiden Übergangsenergien

$$\Delta E(^3P - ^1P) = 13.3 \pm 0.3 \text{ eV}$$

Im Rahmen der Näherung der LS-Kopplung ohne MCF ergibt sich für den theoretischen Wert des Abstands

$$\Delta E(^3P - ^1P) = \frac{2}{3} G^1(1s, 2p)$$

als Differenz der beiden Multiplettenergien mit

$E(1s2p)^1P = E_{\text{average}} + 1/2 G^1(1s, 2p)$ und $E(1s2p)^3P = E_{\text{average}} - 1/6 G^1(1s, 2p) / 23/$. Die Aufspaltung auf Grund der Spin-Bahn Wechselwirkung ist hier nicht enthalten. Unter Berücksichtigung der Spin-Bahn Wechselwirkung erhält man für die Übergangsenergien nach Condon und Shortley /33/ vier Energiewerte für die Elektronenkonfiguration (1s2p):

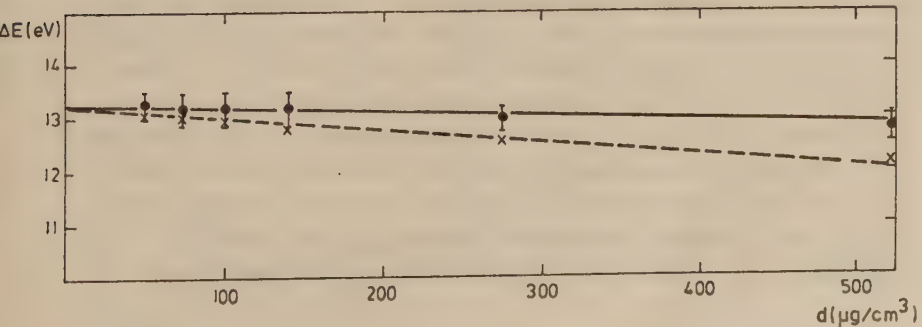
$$E(^3P_2) = E_{av} - \frac{1}{6} G^1 + \frac{1}{2} \zeta(2p)$$

$$E(^1P_1) = E_{av} + \frac{1}{6} G^1 - \frac{1}{4} \zeta(2p) + \left[\left(\frac{G^1}{3} + \frac{1}{4} \zeta(2p) \right)^2 + \zeta^2(2p) / 2 \right]^{1/2}$$

$$E(^3P_1) = E_{av} + \frac{1}{6} G^1 - \frac{1}{4} \zeta(2p) - \left[\left(\frac{G^1}{3} + \frac{1}{4} \zeta(2p) \right)^2 + \zeta^2(2p) / 2 \right]^{1/2}$$

$$E(^3P_0) = E_{av} - \frac{1}{6} G^1 - \zeta(2p)$$

Abb. 18: Abstand $\Delta E(^3P - ^1P)$ als Funktion der Targetdicke
x experimentelle Werte, • korrigiert für den
Energieverlust der Ionen.



Dabei ist G^1 das Austauschintegral der elektrostatischen Wechselwirkung der beiden Elektronen. $\{2p\}$ ist der Spin-Bahn-Parameter für die Spin-Bahn Wechselwirkung. Ein numerischer Wert für $\{2p\}$ wird mit den Ergebnissen der Rechnung im Programm von Froese Fischer ausgedruckt. Bei der Berechnung der Energien für die 4 Energiewerte der Konfiguration $(1s2p)$ wird die Spin-Bahn Wechselwirkung als Störung zu der zuvor mit dem Hartree Fock Programm berechneten Energie betrachtet. Bei der Berechnung der Energien für die Zustände 3P_1 und 1P_1 wird die Mischung und Wechselwirkung der beiden Zustände berücksichtigt.

Eine Zusammenstellung der Übergangsenergien für $(1s2p)^3P_{0,1,2} - (1s^2)^1S_0$ und $(1s2p)^1P_1 - (1s^2)^1S_0$ ist in Tabelle 2 gegeben. Die FF Energien wurden gewonnen, indem die mittleren Multiplettenergien für $(1s2p)^3P$ und $(1s2p)^1P$ im Froese Fischer Programm berechnet wurden. Die zitierten Werte von Fricke /24/ wurden mit dem Programm von J.P. Desclaux in jj-Kopplung mit Multikonfigurationswechselwirkung bestimmt. Snyder gibt eine Korrektur der Lande-Intervall Regel an. /34/ Diese Regel besagt, daß das Verhältnis der Multiplett-Abstände $R = (2S+1)_{L_J} - 2S+1)_{L_{J-1}} / (2S+1)_{L_{J-1}} - 2S+1)_{L_{J-2}}$ den Wert $J/(J-1)$ hat. Abweichungen von dieser Regel werden durch die Spin-Bahn Wechselwirkung hervorgerufen. Snyder gibt Korrekturterme an, die durch Entwicklung der relativistischen Multiplettenergien nach Funktionen von Z erhalten werden. Danach gilt für den Fall $(1s2p)^3P$

$$R = 2 + \frac{8.5333}{Z} + O(Z^{-2})$$

Den Wert $R = 2$ erhält man ebenfalls durch Berechnung des Abstandsverhältnisses aus der Spin-Bahn Aufspaltung nach Condon und Shortley, wenn die Terme, die quadratisch in ξ sind, vernachlässigt werden. Verwendet man diese Beziehung und die Energiewerte für die 3P_2 und 3P_0 - Multipletts aus den Hartree Fock Rechnungen kann, die 3P_1 Energie berechnet werden. Dies ist für Ergebnisse von Fricke und für die eigenen Rechnungen nach Froese Fischer vorgenommen worden. (siehe Tabelle 3) Außerdem gibt Snyder noch eine Methode an, den Abstand Δ

	$(1s2p)^1P_1 - (1s^2)^1S_0$	$(1s2p)^3P_0 - (1s^2)^1S_0$	$(1s2p)^3P_1 - (1s^2)^1S_0$	$(1s2p)^3P_2 - (1s^2)^1S_0$
FF nicht rel. korr.	2452.37	2437.85	2438.42	2440.36
FF rel.-korr.	2460.71	2446.18	2446.76	2448.70
Fricke jj-koppl. rel., mit MCF	2460.18	2445.76	2446.47	2448.15

Tabelle 2: Vergleich der theoretischen Übergangsenergien unter Berücksichtigung der Spin-Bahn Aufspaltung

Tabelle 3: Vergleich der theoretischen Übergangsenergien für $(1s2p)^3P_1 - (1s^2)^1S_0$ berechnet mit der korrigierten Landé-Intervall Regel nach Snyder

	$(1s2p)^3P_1 - (1s^2)^1S_0$
mit $\Lambda = {}^3P_2 - {}^3P_0$ von Fricke	2446.54
mit $\Lambda = {}^3P_2 - {}^3P_0$ aus FF	2447.13
mit $\Lambda = \Delta E_{\text{aver}}$ aus Desclaux	2446.54

von $^3P_2 - ^3P_0$, der maximalen Aufspaltung der $(1s2p)^3P$ Multipletts aus dem Unterschied von mittleren Energien von Konfigurationen in jj-Kopplung zu bestimmen /35/. Hiernach ist für die Konfiguration sp oder sp^5 für den Triplettzustand Λ gegeben als

$$\Lambda = \alpha - \beta$$

wobei $\alpha - \beta$ dem Sprung eines $2p_{1/2}$ Elektrons in das Niveau eines $2p_{3/2}$ Elektrons entspricht. Das ist nichts anderes, als die Differenz der E_{average} Werte, die man mit dem Programm von J.P. Dexclaux für die Fälle $(1s2p_{1/2})$ und $(1s2p_{3/2})$ erhält. Mit diesem Wert aus dem Programm und der Landé Intervall Regel kann ebenfalls die Energie des Übergangs $(1s2p)^3P_1 - (1s^2)^1S_0$ berechnet werden. (siehe Tabelle 3)

Für einen Vergleich der theoretischen Werte des Abstands $^3P-^1P$ mit den experimentellen Ergebnissen muß die Zusammensetzung des experimentell beobachteten Übergangs diskutiert werden.

Der Übergang $(1s2p)^3P_1 - (1s^2)^1S_0$ hat eine Lebensdauer von 1.6×10^{-12} sec. Das bedeutet, daß innerhalb der Sichtstrecke des Spektrometers von 8 mm der Zerfall vollständig gesehen werden kann. Für den Übergang $(1s2p)^3P_2 - (1s^1)^1S_0$ haben Cocke et al. /26/ 2.5 ns als Lebensdauer gemessen. Das bedeutet, daß innerhalb der 8 mm Sichtstrecke 13 % der Ionen in den Grundzustand zerfallen. Hierbei ist der Geschwindigkeitsverlust auf Grund des Energieverlusts vernachlässigt. Eine Computersimulation der Überlagerung von zwei Strahlungen, die nur wenig gegeneinander verschoben und sehr unterschiedlich in der Intensität sind, durch die Überlagerung zweier Gauß-Kurven zeigt, daß die Lage des gemeinsamen Schwerpunkts gut beschrieben wird durch die einfache Beziehung:

$$E(^3P_{1,2}) = \frac{1}{3.65} [0.65 E(^3P_2) + 3 E(^3P_1)]$$

Bei dieser Formel wird statistische Besetzung der beiden Feinstrukturzustände mit der Wichtung nach $2J+1$ angenommen. Damit erhält man für den Abstand der beobachteten Triplett- und Singulett-P Übergänge:

	Exper.	Fricke	FF
$E(^3P_{1,2} - ^1P_1) [\text{eV}]$	13.3	13.4	13.6

Der von B. Fricke in jj-Kopplung mit MCF gerechnete Abstand stimmt besser mit dem Experiment überein, als der in LS Kopplung gerechnete Abstand. Insgesamt ist die Übereinstimmung von Theorie und Experiment jedoch als gut zu bezeichnen.

2.2.5 Einfluß von äußeren Elektronen

Bei der Festlegung des Beobachtungswinkels des Spektrometers im Rahmen der Eichung ist angenommen worden, daß die Linie, die bei 2614.5 eV beobachtet wird, dem Übergang $(2p)^2P-(1s)^2S$ in wasserstoffähnlichem Schwefel zugeordnet werden kann. Diese Annahme führt zu einem Beobachtungswinkel von 89.73° innerhalb der apparativ möglichen $90^\circ \pm 1^\circ$. Andererseits ist es möglich, daß sich zusätzlich ein Elektron auf höheren äußeren Niveaus des Ions befindet. Dadurch werden die Energieniveaus der inneren Elektronen beeinflusst und so die beobachteten Übergangsenergien geringfügig verschoben. (siehe 2.2.1)

Um die Auswirkung eines solchen 'spectator' Elektrons zu bestimmen, wurden relativistische Hartree-Fock Rechnungen durchgeführt, wobei der Übergang $(1s2p)-(1s^2)$ mit den Übergängen $(1s2pnp)-(1s^2np)$ verglichen wurde. Dabei wurde als np Elektron ein 3p, 4p, 5p und 6p Elektron betrachtet. Berechnet wurden sowohl die mittlere Energie dieser Übergänge als auch die Multipllett-Übergänge $(1s2pnp)^3P-(1s^2np)^1S$ und $(1s2pnp)^1P-(1s^2np)^1S$. Bei der Berechnung der Multipllettenergien wurden die Beiträge der $G^1(np,1s)$, $F^0(np,1s)$, $F^0(np,2p)$ und $G^0(np,2p)$ vernachlässigt. Das Ergebnis zeigt die Tabelle 4:

zusätzl. Elektron	E (eV)
3p	6.9
4p	2.6
5p	1.3
5p	0.7

Tabelle 4: Verschiebung der Übergangsenergie $(1s2p)-(1s^2)$ auf Grund äußerer Elektronen

Die zusätzliche Anwesenheit eines 3p Elektrons bei dem Wasserstoff-ähnlich angenommenen Übergang mit einer beobachteten Energie von 2614.5 eV, d.h. man hätte die Besetzungen (2p3p)-(1s3p), verlangt dann einen Beobachtungswinkel von 88° . Dies kann jedoch auf Grund der apparativen Verhältnisse ausgeschlossen werden. Für ein zusätzliches 4p Elektron würde als Konsequenz ein Beobachtungswinkel von 89° notwendig sein. Dieser Wert liegt noch im Bereich der apparativen Toleranz. Andererseits ist die Anwesenheit von N Elektronen bzw. auch noch weiter äußer Elektronen, bei S Ionen einer Energie von etwa 100 MeV auf Grund des großen Verhältnisses σ^I / σ^C von Ionisierungs- zu Einfangsquerschnitt unwahrscheinlich. Analog zu der Besetzung von Wasserstoff-ähnlichen Zuständen (siehe 4.1.) wird die Besetzung von N Elektronen etwa 0.03 der Besetzung von L Elektronen sein.

2.2.6 Linienbreiten und Untergrund in den Spektren

(i) Linienbreiten

Die natürliche Linienbreite eines Übergangs wird durch die Niveaubreiten des Anfangs- und des Endzustands bestimmt. Unter Berücksichtigung aller möglichen Zerfallskanäle ergibt sich zum Beispiel für die charakteristische K_α Strahlung von einfach ionisiertem Schwefel eine natürliche Linienbreite von 0.6 eV /36/. In hochionisiertem Schwefel ergibt sich für den Übergang (2p)²P-(1s)²S eine natürliche Linienbreite von 2.7×10^{-2} eV. Dabei wird angenommen, daß der Endzustand als Grundzustand scharf ist. Für den (2p)²P Zustand ist eine totale Lebensdauer von 2.44×10^{-14} verwendet worden /25/. Die deutlich kleinere Linienbreite wird bedingt durch die höhere Lebensdauer des Zustands in Folge der geringen Elektronenzahl. Dieser Ansatz läßt jedoch eine mögliche Stoßverbreiterung außer Betracht. Beim Durchflug eines Ions hoher Energie durch eine Targetfolie werden die Niveaubreiten nicht nur durch die Kanäle der Relaxation mittels Röntgen- und Augerübergänge bestimmt. Zusätzlich müssen hier die Beiträge zur Niveaubreite auf Grund von Ioni-

sierung, Anregung und Elektroneneinfang berücksichtigt werden. Dies gilt sowohl für den Anfangs- als auch für den Endzustand. Wegen der Größe dieser Wirkungsquerschnitte werden deshalb die Niveaubreiten vorwiegend durch diese beiden Prozesse bestimmt werden. Eine Abschätzung für 92 MeV S auf Aluminiumtargets ergibt für die Projektilstrahlung eine natürliche Linienbreite im Bereich von 2 eV. Das bedeutet andererseits, daß die Linienbreiten für Übergänge in hochionisierten Atomen verschieden sein sollten, wenn die Übergänge entweder in der Folie oder außerhalb des Targets im Vakuum stattfinden.

Hierfür bieten sich Vergleiche von Übergängen von prompt zerfallenden und metastabilen Zuständen an. In den beobachteten Spektren konnte dieser Effekt nicht festgestellt werden.

(ii) Untergrund

Spektren, in denen die charakteristische Röntgenstrahlung durch 9 keV Elektronen angeregt wird, zeigen ein anderes Peak/Untergrund Verhältnis als solche, in denen 92 MeV Schwefel Ionen angeregt werden.

Kristall	Anregung durch 9 keV e^-	Anregung durch 92 MeV S
ADP 0.45° Spalte	19:1	10:1
ADP 0.15° Spalte	2:1	3:1
NaCl 0.15° Spalte	96:1	30:1

Tabelle 5: Vergleich des Peak/Untergrund-Verhältnisses für verschiedene Analysatorkristalle und Sollerspalte

In Tabelle 5 wird die $Cl(K_{\alpha})$ Strahlung aus den Eichspektren dem $(1s2p)^1P - (1s^2)^1S$ Übergang in 92 MeV Schwefel-Ionen gegenübergestellt.

Zur Produktion der Untergrundstrahlung können vier Prozesse beitragen:

- 1) Elastische Streuung von Bremsstrahlung, Beobachtung der Beiträge von verschiedenen Ordnungen
- 2) Inelastische Streuung der gesamten auf dem Kristall treffenden Strahlung (thermisch diffuse Streuung)
- 3) Fluoreszenzanregung von Strahlung des Kristallmaterials
- 4) Comptonstreuung hochenergetischer Photonen im Detektor

Im Fall der Anregung von 92 MeV Schwefelionen ist der Anteil der Projektilbremsstrahlung wegen der großen Masse des Projektils zu vernachlässigen. Andererseits fällt hier im Gegensatz zu der Anregung mit Elektronen der Beitrag der Comptonstreuung stark ins Gewicht. An den Blenden des Strahlführungssystems, am Target und im Faraday Cup wird γ -Strahlung mit MeV Energien produziert, die durch die Kammerwände in den Proportionalzähler gelangt. Mit Bleiziegeln konnte das Spektrometer gegen die Strahlung vom Faraday Cup und von den Strahlrohrblenden abgeschirmt werden. Der Untergrund wurde um 25 % verringert. Die Blenden in der Targetkammer und der Targetrahmen können auf diese Art nicht abgeschirmt werden.

Experimentell kann man versuchen, die hochenergetischen Impulse des Proportionalzählers auf Grund der Compton-Streuung elektronisch von den gewünschten Impulsen der Röntgenstrahlung zu diskriminieren. Die störenden Comptonereignisse sollten Pulse produzieren, deren Anstiegszeit länger ist, als bei den Photonen im keV Bereich. Durch Anwendung von PSD (pulse shape discrimination) lassen sie sich dann trennen. /37/ In beiden Kristallen kann Strahlung des Kristallmaterials durch Fluoreszenz angeregt werden: Im NaCl sowohl Natrium- als auch Chlor-, im ADP Phosphor-Strahlung. Die Beiträge auf Grund von Fluoreszenz und inelastischer Streuung sind proportional zur Intensität der Strahlung, die in das Spektrometer gelangt. Bei Verkleinerung des Durchlaßwinkels der Eintrittsspalte sollte demnach im Fall der Anregung von Schwefelionen das Peak/Untergrund-Verhältnis schlechter werden, da der Beitrag auf Grund der Comptonstreuung der γ -Quanten konstant bleibt, während die Röntgenintensität abnimmt.

Röntgenstrahlung kann, im Gegensatz zu Strahlung im sichtbaren Bereich, beim Übergang von Vakuum in Materie totalreflektiert werden. In diesem Fall muß der Einfallswinkel der Röntgenstrahlung kleiner sein als ein Grenzwinkel ϑ_c /38/, der definiert ist als

$$\vartheta_c = \sqrt{2\delta}$$

Die Größe von δ wird durch die Beziehung für den Brechungsindex von Röntgenstrahlung bestimmt. Für Strahlung der Wellenlänge λ ist der Brechungsindex μ definiert als /39/:

$$\mu = 1 - \delta = 1 - 2.74 \times 10^{-10} \frac{Z^2}{W}$$

In dieser Formel sind Z und W die Kernladungszahl bzw. das Atomgewicht des Grenzflächenmaterials und ρ die Dichte des Materials. λ und ρ sind in cgs Einheiten einzusetzen.

In dem von uns verwendeten Spektrometer kann Röntgenstrahlung an den einzelnen Platten der Sollerspalt totalreflektiert werden. Für die Strahlung der angeregten Schwefelionen von etwa 2.5 keV ist der Grenzwinkel $\vartheta_c = 1.3^\circ$. Dieser Winkel ist größer als die Durchlaßwinkel der verwendeten Eingangskollimatoren.

Für die 0.45° Sollerspalt entspricht ein Winkel $\vartheta_c = 0.45^\circ$ einer Grenzenergie von 7.4 keV. Dabei wird Strahlung mit höherer Energie in den Platten absorbiert, wenn die Winkeldivergenz zur Durchlaßrichtung des Kollimators größer als 0.45° ist. Strahlung kleinerer Energie und einer Divergenz größer als der Durchlaßwinkel kann totalreflektiert werden und gelangt so ins Spektrometer. Bei den 0.15° Sollerspalten entspricht der Grenzwinkel $\vartheta_c = 0.15^\circ$ einer Grenzenergie der Totalreflektion von 22 keV.

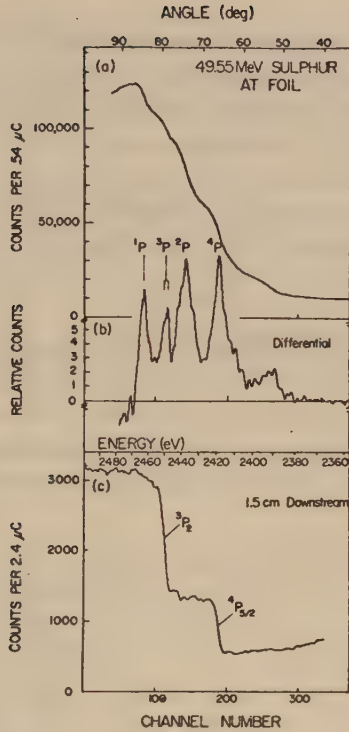
In den Röntgenspektren, die durch Ionenanregung gewonnen wurden, trägt die Totalreflexion nicht zur Änderung des Peak/Untergrund-Verhältnisses bei, da hier die Projektilbremsstrahlung wegen der großen Masse des Projektils zu vernachlässigen ist und vom Target effektiv nur die charakteristische Strahlung ins Spektro-

meter gelangt. Die beobachtete Verschlechterung des Peak/Untergrund-Verhältnisses wird hier durch Verkleinerung des Raumwinkels bei der Reduzierung des Durchlaßwinkels der Sollerspaltte bestimmt. Gleichzeitig bleibt der Anteil auf Grund der Comptonstreuung der γ -Quanten konstant.

Bei den durch Anregung mittels Elektronenbeschuß gemessenen Spektren liefert die Elektronenbremsstrahlung den größten Intensitätsanteil des Spektrums. Bei den 0.15° Sollerspaltten kann auf Grund der Totalreflektion mehr höherenergetische Strahlung ins Spektrometer gelangen als bei den 0.45° Spalten. Diese zusätzliche Strahlungsintensität führt zu steigendem Untergrund auf Grund von elastischer und inelastischer Streuung und von Fluoreszenzanregung im Kristall, wenn die Durchlaßdivergenz der Sollerspaltte verkleinert wird.

2.3 Vergleich mit Ergebnissen anderer Autoren

Cocke et al. /26/ haben Röntgenstrahlung von Schwefelionen untersucht, die beim Durchflug durch eine dünne Folie angeregt wurden. Die Projektilenergie betrug 50 MeV. Als Nachweisgerät für die Röntgenstrahlung verwendeten sie ein Doppler-Spektrometer (DTS = Doppler tuned spectrometer): Durch Wahl einer Absorberfolie mit scharfer Absorptionskante wird erreicht, daß nur Strahlung mit Energien bis zu E_{abs} der Energie der Absorptionskante, ins Spektrometer gelangt. Für Strahlung, die von schnellen Ionen emittiert wird, ist die im Spektrometer registrierte Strahlung eine Funktion des Beobachtungswinkels zur Bewegungsrichtung des Ions (Dopplerverschiebung!). Durch Veränderung dieses Winkels wird bei fester Energie E_{abs} das gesamte Emissionsspektrum schrittweise als Funktion des Winkels von der Folie durchgelassen und gelangt in den Zähler. Das Ergebnis ist ein Spektrum, das für jeden Beobachtungswinkel das Integral der Photonenintensität angibt. Durch Differentiation des Spektrums kann ein Linienspektrum gewonnen werden.



Sulphur transition energies (in eV)

Initial state	Final state	Theory	Observed At foil	Observed Downstream	Configuration average
$(1s2p) \ ^1P^o$	$(1s^2) \ ^1S^e$	2461.1	2461.8 ± 3		Helium-like
$(1s2p) \ ^3P_1^o$	$(1s^2) \ ^1S^e$	2447.7	2448.0 ± 3		2448
$(1s2p) \ ^3P_2^o$	$(1s^2) \ ^1S^e$	2449.2		2448 ± 2	
$(1s2p^2) \ ^2P^e$	$(1s^22p) \ ^2P^o$	2438.2	2435.3 ± 3		
$(1s2p^2) \ ^4P^e$	$(1s^22p) \ ^2P^o$	2419.6	2416.5 ± 3	$2416.5 \pm 2,$	Lithium-like
$(1s2s2p) \ ^4P^o$	$(1s^22s) \ ^2S^e$	2416.8		2426 ± 26	2427
$(1s2p^3) \ ^3S^o$	$(1s^22p^2) \ ^3P^e$	2413.3	(2409)		Beryllium-like
$(1s2s2p^2) \ ^5P^o$	$(1s^22s2p) \ ^3P^o$	2390.2	2388.0 ± 3		2408

Abb. 19: Ergebnisse von Cocke et al. /26/ für die Folienanregung von 50 MeV S Ionen

Mit diesem Spektrometer haben Cocke et al. sowohl prompte als auch verzögerte Emission von Strahlung untersucht, indem das Spektrometer wahlweise direkt auf die Folie bzw. hinter das Target gerichtet war. Ihre Ergebnisse sind in Abbildung 19 wiedergegeben. Sie identifizieren Übergänge in Helium- und in Lithium-ähnlichen Schwefelionen. Auf Grund ihrer relativ geringen Projektilenergie werden keine Übergänge in Wasserstoff-ähnlichem Schwefel beobachtet.

Im Rahmen von astrophysikalischen Untersuchungen sind im Röntgenspektrum der Sonne Übergänge in Helium-ähnlichen und Lithium-ähnlichen Atomen nachgewiesen worden. Walker und Rugge /40/ haben dabei solche Übergänge in hochionisiertem Schwefel beobachtet. Ihre Ergebnisse sind in Tabelle 6 zusammengefaßt.

Übergang	Energie (eV)
$(1s2p)^1P - (1s^2)^1S$	2460.3
$(1s2p)^3P - (1s^2)^1S$	2447.7
$(1s2s2p)^2P - (1s^22s)^2S$	2439.0
$(1s2s)^3S - (1s^2)^1S$	2430.9

Tab. 6: Ergebnisse von Walker und Rugge /40/: Übergänge in hochionisiertem Schwefel im solaren Röntgenspektrum.

3. Lebensdauern von Multiplettzuständen

3.1 Targetdickenabhängigkeit der Produktion von Projekttilstrahlung

Bei Messungen von Röntgenstrahlung mit einem Si(Li)Detektor haben wir beobachtet, daß die Ausbeute von charakteristischer Projekttilstrahlung nicht in allen Fällen proportional der Targetdicke ist /41,42/. In Abbildung 20 ist die Targetdickenabhängigkeit der Ausbeute von S(K)Strahlung gezeigt, die beim Beschuß von dünnen Cu, Al und Ge Folien mit 110 MeV Schwefel-Ionen angeregt wird.

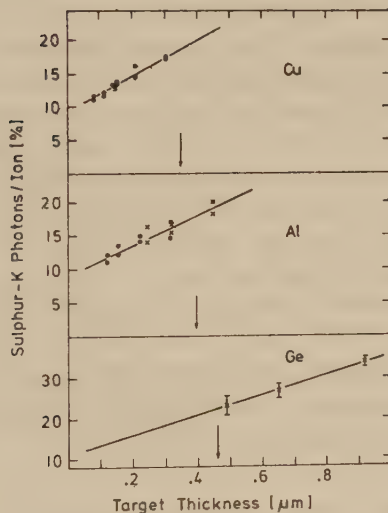


Abb. 20: Produktion von S(K)Strahlung beim Beschuß von Cu, Al, Ge Folien als Funktion der Targetdicke

Das Auflösungsvermögen des Si(Li) Detektors reicht nicht aus, um Aussagen über die Targetdickenabhängigkeit der Übergänge von verschiedenen Multipllettzuständen zu ermöglichen. Dagegen können mit dem Kristallspektrometer einzelne Zustände identifiziert werden. Durch Variation der Targetdicke kann dann analog zu den Messungen mit dem Si(Li) Detektor die Ausbeutekurve für einen definierten Übergang eines Multipllettzustandes gewonnen werden. /43/ Diese Experimente wurden mit freitragenden Aluminium Folien durchgeführt. Das Technologische Labor der Sektion Physik stellte dafür Al Targets mit Dicken zwischen $32 \mu\text{g}/\text{cm}^2$ und $370 \mu\text{g}/\text{cm}^2$ her. Die Unsicherheit der Targetdicke beträgt bei den dünnen Targets $\pm 10 \%$ und bei den dickeren Targets ab $100 \mu\text{g}/\text{cm}^2 \pm 5 \%$. Die Folien wurden unter 45° zur Strahlrichtung in die Streukammer eingebaut. Dadurch standen geometrische Targetdicken zwischen $0.18 \mu\text{m}$ und $2 \mu\text{m}$ zur Verfügung.

Die beim Beschuß der Folien mit 92 MeV Schwefel-Ionen angeregte Strahlung der Projektile wird senkrecht zur Strahlrichtung im Spektrometer nachgewiesen. Bei der Bestimmung von Linienintensitäten als Funktion der Targetdicke muß die Absorption der Strahlung im Target berücksichtigt und das Spektrum entsprechend korrigiert werden. Diese Korrektur ist verschieden, wenn das Spektrometer die Vorderseite oder die Rückseite des Targets sieht. Im ersten Fall sind sowohl der Anteil der Strahlung, der im Target emittiert wird, als auch der Teil, der emittiert wird, wenn das Ion bereits außerhalb des Targets ist, für die Absorption der Strahlung im Target zu korrigieren. (siehe 3.2)

Für den Fall, daß das Spektrometer die Rückseite des Targets sieht, ist nur für den Anteil der Strahlung zu korrigieren, der innerhalb des Targets emittiert wird.

Die Beziehungen für die Absorptionskorrektur sind:

(i) Emission innerhalb des Targets:

$$N_i = N_{oi} (1 - e^{-\mu d}) / \mu d$$

(ii) Emission außerhalb des Targets:

$$N_a = N_{oa} e^{-\mu d}$$

In diesen Formeln sind die N_{oi}, N_{oa} die innen bzw. außen emittierten Photonen für den betrachteten Übergang, N_i und N_a die davon beobachteten Photonen, d die effektive Dicke des Targets und μ der Absorptionskoeffizient.

An Hand der Ausbeuten für sehr dünne Targets läßt sich der Anteil der Röntgenausbeute ermitteln, der außerhalb der Folie emittiert wird. (siehe 3.2) Damit lassen sich beide Absorptionsanteile für die dickeren Targets korrigieren. Bei den dicksten verwendeten Targets beträgt die Korrektur 36 % der beobachteten Intensität.

In den Abbildungen 21 a,b sind die Röntgenausbeuten für verschiedene Multipllettübergänge in hochionisiertem Schwefel als Funktion der Al Targetdicke dargestellt. In der Abbildung 21a sind die Ergebnisse für die Übergänge $(1s2p^2)^4P - (1s^22p)^2P$, ① ; $(1s2p^2)^2P, D - (1s^22p)^2P$, ② ; $(1s2p)^3P - (1s^2)^1S$, ③ und $(1s2p)^1P - (1s^2)^1S$, ④ aufgetragen. Bei den Lithium-ähnlichen Zuständen kann auf Grund der Auflösung des Spektrometers nicht zwischen $(1s2p^2)$ und $(1s2s2p)$ bzw. $(1s^22p)$ und $(1s^22s)$ unterschieden werden.

In Abbildung 21b ist die Ausbeutekurve für den Übergang in Wasserstoff-ähnlichem Schwefel $(2p)^2P - (1s)^2S$, ⑦ aufgetragen.

Bei diesen Ergebnissen ist das Auftreten von zwei verschiedenen Typen von Ausbeutekurven auffällig. Für die prompten Übergänge wird ein Anwachsen der Ausbeute mit der Targetdicke beobachtet, während für die beiden Übergänge von metastabilen Zuständen die Ausbeute für Targetdicken größer als $0.5 \mu m$ nahezu konstant bleibt.

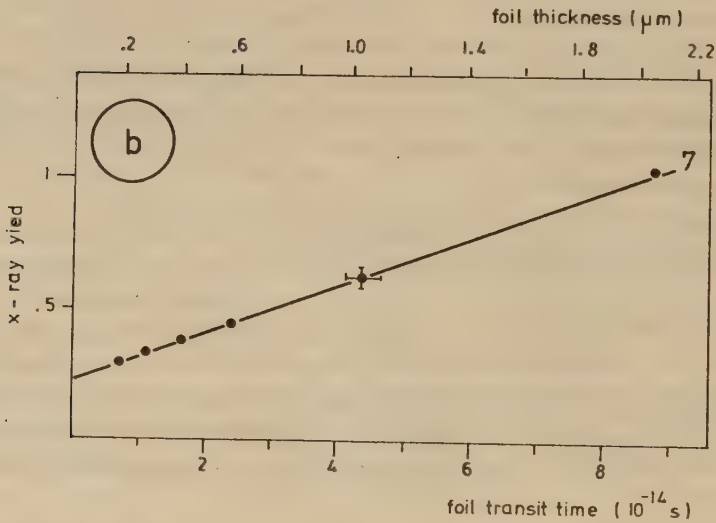
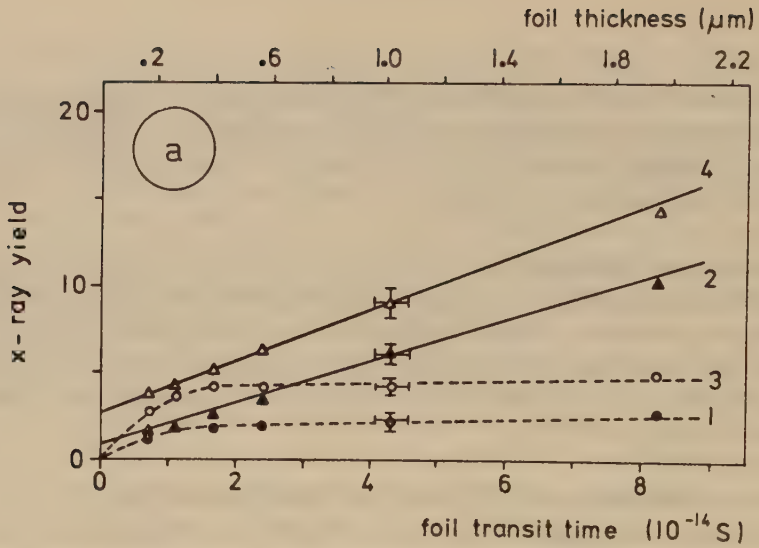


Abb. 21: Röntgenausbeute für verschiedene Multiplettübergänge in hochionisiertem Schwefel als Funktion der Targetdicke. Numerierung der Übergänge wie in Tabelle 1.

3.2 Allgemeines Modell zur Beschreibung der nichtproportionalen Röntgenausbeute

Wenn schwere Ionen auf ein Target treffen, lassen sich Anregung und Ladungsaustausch beobachten. Aus einem definierten Anfangszustand, z.B. S^{10+} , wird innerhalb der Folie eine Verteilung der Ionen in verschiedenen Ladungs- und Anregungszuständen erzeugt.

Für die Projektile gilt, daß vor Eintritt des Ions in das Target keine angeregten Zustände besetzt sind. ($N^i=0$) Jeder angeregte Zustand i wird dann mit zunehmender Targetdicke mehr besetzt, so daß nach einer Targetdicke x^i , oder der zugehörigen Durchflugzeit t^i die Gleichgewichtsbesetzung N_O^i erreicht wird. Diese Zeit ist für die verschiedenen Zustände im allgemeinen unterschiedlich. Ist die Durchflugzeit t_O durch das Target größer als die individuelle Aufbauzeit t^i , dann ist für die restliche Durchflugzeit die Gleichgewichtsbesetzung N_O^i vorhanden.

In dem Augenblick, in dem das Ion aus dem Target austritt, ist demnach die Besetzung N_O^i gegeben. Außerhalb des Targets, im Vakuum gibt es jedoch keine weitere Möglichkeit der Anregung, so daß nur Relaxation und Abnahme der Besetzung möglich ist. Beschreibt man den Aufbau der Gleichgewichtsbesetzung N_O^i im Target allgemein durch eine Funktion $f^i(t)$ und die Relaxation hinter dem Target allgemein durch eine Funktion $g^i(t)$, siehe Abbildung 22, dann gilt zu einem beliebigen Zeitpunkt t innerhalb der Folie:

$$N^i(t) = N_O^i (1 - f^i(t)); \quad t = 0 : \text{Eintritt in die Folie}$$

Dabei ist $N^i(t)$ die momentane Besetzungsdichte und $f^i(t)$ die Aufbaufunktion mit den Randbedingungen $f^i(0) = 1$ und $f^i(\infty) = 0$. Die Funktionen f^i sind unter anderem abhängig von den Wirkungsquerschnitten für die Ionisierung der einzelnen Elektronen, Anregung von Elektronen in äußere Niveaus, strahlende und nichtstrahlende Übergänge äußerer Elektronen und Einfang von Targetelektronen in innere Löcher.

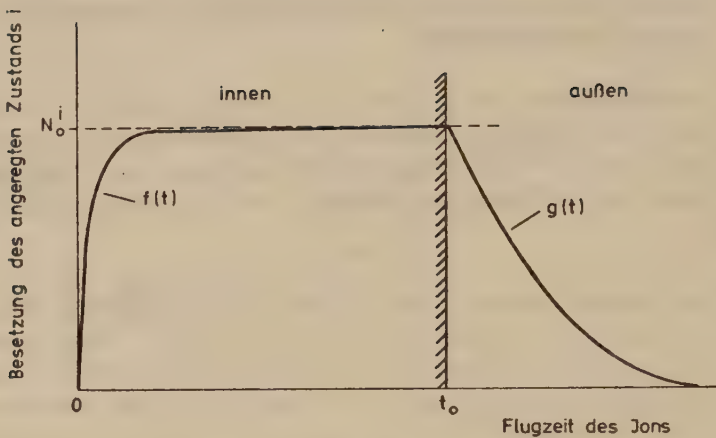


Abb. 22: Schematische Darstellung der Besetzung eines angeregten Zustands i als Funktion der Durchflugzeit durch das Target

Für die Besetzung außerhalb der Folie gilt

$$N^i(t) = N_0^i (1 - f^i(t_0)) \cdot g^i(t); \quad t = 0 : \text{Austritt aus der Folie}$$

$g^i(t)$ beschreibt die Abnahme der Besetzung des angeregten Zustands i und enthält nur die Wirkungsquerschnitte für Relaxation durch strahlende und nichtstrahlende Übergänge äußerer Elektronen sowie etwaige Kaskadeneffekte.

Für $g^i(t)$ gelten die Randbedingungen $g^i(0) = 1$, $g^i(\infty) = 0$.

Für die beobachtete Projektilröntgenstrahlung gilt dann

$$Y^i = Y_{\text{innen}}^i + Y_{\text{außen}}^i$$

Man erwartet also Beiträge von Übergängen, während das Ion noch im Target ist und zusätzlich von Übergängen nachdem das Ion das Target bereits verlassen hat. Insgesamt gilt für

Durchflugzeiten t_o :

$$y^i(t_o) = \int_0^{t_o} \frac{N_o^i}{\tau_R^i} (1 - f^i(t)) dt + \int_0^{\infty} \frac{N_o^i}{\tau_R^i} (1 - f^i(t_o)) g^i(t) dt$$

$$= \frac{N_o^i}{\tau_R^i} \left[t_o - \int_0^{t_o} f^i(t) dt + (1 - f^i(t_o)) \int_0^{\infty} g^i(t) dt \right]$$

Hierbei ist τ_R^i die Lebensdauer des angeregten Zustands i für strahlende Übergänge.

Für Targetdicken, die groß genug sind, so daß die Besetzungsdichte $N_o^i(t_o)$ gleich der Gleichgewichtsbesetzung N_o^i wird, erhält man für $f^i(t_o)$ den Wert $f^i(t_o) = 0$. Damit gilt

$$y^i(t_o) \cong \frac{N_o^i}{\tau_R^i} \left[t_o - \int_0^{\infty} f^i(t) dt + \int_0^{\infty} g^i(t) dt \right]$$

Für die allgemeinen Ansätze $f^i(t)$ und $g^i(t)$ kann man zeigen, daß die Integrale $\int f^i(t) dt$ und $\int g^i(t) dt$ mittels partieller Integration als 1. Momente ausgedrückt werden können.

$$\int_0^{\infty} f^i(t) dt = - \int_0^{\infty} t \frac{df^i(t)}{dt} dt = \langle t_a^i \rangle$$

und

$$\int_0^{\infty} g^i(t) dt = - \int_0^{\infty} t \frac{dg^i(t)}{dt} dt = \langle t_d^i \rangle$$

Damit erhält man für den allgemeinen Ansatz unter Einschluß möglicher Kaskadeneffekte das Ergebnis:

$$y^i(t_o) = \frac{N_o^i}{\tau_R^i} \left[t_o + \langle t_d^i \rangle - \langle t_a^i \rangle \right]$$

Diese Gleichung zeigt, daß für die Fälle, in denen die Aufbauzeit $\langle t_a^i \rangle$ eines angeregten Zustands i im Target gleich ist der Relaxationszeit $\langle t_d^i \rangle$ hinter dem Target, die bekannte Proportionalität der Ausbeute zur Targetdicke erhalten wird.

Andererseits wird klar, daß bei verschiedenen Zeiten $\langle t_d^i \rangle$ und $\langle t_a^i \rangle$ keine Proportionalität der Ausbeute zu erwarten ist. Dies ist dann gegeben, wenn die Wirkungsquerschnitte für Ionisierung, Anregung und den Einfang von Elektronen im Target gegenüber

den außerhalb und innerhalb des Targets auftretenden Querschnitten für strahlende und nichtstrahlende Übergänge nicht zu vernachlässigen sind.

Für den Durchflug von Ionen hoher Energie durch Folientargets ist wegen der großen Elektroneneinfangquerschnitte in den meisten Fällen die Aufbauzeit $\langle t_a^i \rangle$ klein gegen die Relaxationszeit $\langle t_d^i \rangle$. Damit gilt

$$y^i(t_0) = \frac{N_0^i}{\tau_i} [t_0 + \langle t_d^i \rangle] \quad , \quad \langle t_d^i \rangle \gg \langle t_a^i \rangle$$

Nimmt man an, daß die einzelnen Zustände i hinter dem Target nicht durch Relaxation anderer angeregter Zustände produziert werden können, d.h. es gibt keine Kaskadeneffekte, kann $g^i(t)$ durch eine Exponentialfunktion ausgedrückt werden.

$$g^i(t) = e^{-t/\langle t_d^i \rangle}$$

Dabei ist die charakteristische Relaxationszeit $\langle t_d^i \rangle$ gleichbedeutend mit der totalen Lebensdauer τ_i des angeregten Zustandes für Röntgen- und Augerübergänge.

Die letzte Gleichung für y^i läßt zwei verschiedene Typen von Ausbeutekurven erwarten:

- i) für τ^i in der gleichen Größenordnung wie t_0 sollte die Ausbeute der Röntgenstrahlung mit zunehmender Targetdicke linear anwachsen, jedoch wegen des konstanten Beitrags durch τ^i nicht proportional zur Dicke sein.
- ii) für τ^i groß gegen t_0 sollte die Ausbeute nach einer gewissen Aufbauzeit nahezu konstant bleiben.

Die beiden Effekte sind in den experimentellen Ausbeutekurven, Abbildung 21 a.b, beobachtet worden.

Es kann andererseits der Fall auftreten, daß für eine Projektil-Targetkombination die Aufbauzeit $\langle t_a \rangle$ nicht klein ist gegenüber der Zerfallszeit $\langle t_d \rangle$. Damit wird eine effektive Lebensdauer

τ_{eff} bestimmt, die definiert ist als $\tau_{\text{eff}} = \langle t_d \rangle - \langle t_a \rangle$.
 τ_{eff} wird daher kleiner sein, als die totale Lebensdauer τ in den Fällen, in denen $\langle t_a \rangle$ vernachlässigt werden kann.

Ein Beispiel für diesen Fall ist die Anregung von Schwefel beim Durchflug durch Kohlenstoff-Folien. Wegen des kleinen Querschnitts für den Elektroneneinfang ist hier $\langle t_a \rangle$ von der gleichen Größenordnung wie $\langle t_d \rangle$. Abbildung 23 zeigt diesen Effekt:

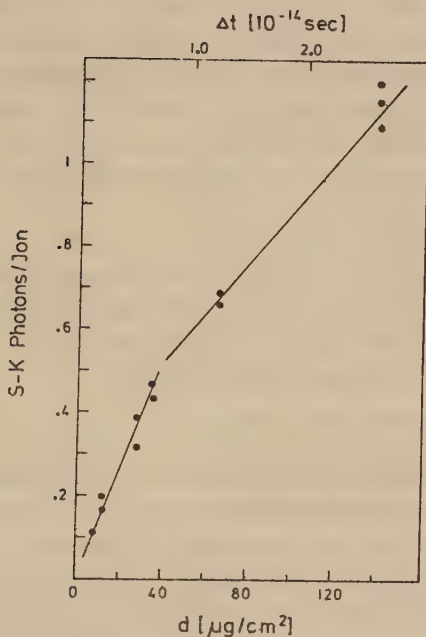


Abb. 23: S(K) Photonenausbeute als Funktion der Targetdicke.
 Anregung beim Durchflug durch C-Targets.

Die Aufbauzeit beträgt hier 0.8×10^{-14} sec. Die experimentell bestimmte effektive Lebensdauer τ_{eff} ist ebenfalls 0.8×10^{-14} sec. Daraus ergibt sich die totale Lebensdauer für Röntgen- und Auger-übergänge $\tau = \tau_{\text{eff}} + \langle t_a \rangle = 1.6 \times 10^{-14}$ sec. Dieser Wert ist in guter Übereinstimmung mit den τ -Werten, die für Al, Cu, Ge gemessen wurden /42/. Für diese Targets ist wegen des bedeutend größeren Wirkungsquerschnitts für den Elektroneneinfang die Aufbauzeit $\langle t_a \rangle$ klein gegenüber $\langle t_d \rangle$. Aus diesem Grund wurde für die Bestimmung der Lebensdauern von Multiplettzuständen, unter Ausnutzung dieser Nichtproportionalität der Röntgenausbeute zu der Targetdicke, Aluminium als Target gewählt.

3.3 Beschreibung durch ein System von Ratengleichungen

Die zeitliche Veränderung der Besetzung eines angeregten Zustandes i wurde im vorhergehenden Abschnitt allgemein durch zwei charakteristische Funktionen $f^i(t)$ und $g^i(t)$ beschrieben. Zur konkreten Beschreibung des Aufbaus und der Abnahme eines bestimmten Zustands als Funktion der Zeit kann man eine Ratengleichung ansetzen.

Im Rahmen dieses Modells sollen nur Atome mit Elektronen in der K und L Schale beschrieben werden. Weiter äußere Elektronen werden vernachlässigt. Dann gilt zu jedem Zeitpunkt für die Besetzung der einzelnen Zustände im Ionenstrahl:

$$\sum_{i=0}^g (n_i + n^i) = 1$$

Der laufende Index i zählt die vorhandenen L Elektronen. Die Bruchteile n_i sind die Zustände des Strahls ohne K-Schalen Anregung, d.h. hier sind zwei K Elektronen vorhanden. Die Bruchteile n^i sind einfach K-Schalen angeregte Zustände, d.h. es ist nur noch ein K-Elektron vorhanden. Doppelte K-Schalen Anregung läßt sich mit dieser Nomenklatur nicht beschreiben.

Als Anfangsbedingung gilt für die Verteilung der Bruchteile im Strahl:

$$\{n^i\} = (0)$$

und

$$\{n_i\} = \begin{pmatrix} n_1=0 \\ \vdots \\ n_i=1 \\ \vdots \\ n_{i+1}=0 \end{pmatrix}$$

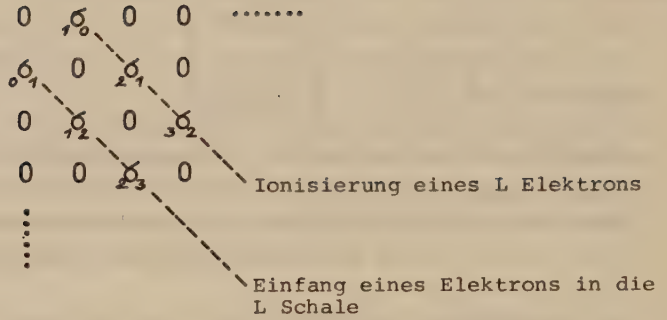
Diese beiden Spaltenvektoren zeigen, daß der Strahl im Ladungszustand $(Z-(1+2))$ fachgeladen im Grundzustand ist. Die beim Durchgang durch die Stripperfolie im Tandem angeregten Zustände sind bereits wieder in den Grundzustand übergegangen.

Für die Prozesse, die beim Durchflug der Ionen durch das Target stattfinden, können folgende Wirkungsquerschnitte angesetzt werden; hierbei beschreibt der linke Index den Ausgangszustand und der rechte Index den Endzustand für einen Stoß:

- | | | |
|-----|--------------------|---|
| 1) | ${}_i\sigma_{i-1}$ | Ionisierung (=Anregung) eines L Elektrons |
| 1a) | ${}_i\sigma^{i-1}$ | Ionisierung (=Anregung) eines L Elektrons, wobei gleichzeitig 1 K-Loch vorhanden ist. |
| 2) | ${}_i\sigma_{i+1}$ | Einfang eines Elektrons in die L Schale |
| 2a) | ${}_i\sigma^{i+1}$ | analog zu 2 für angeregte Zustände |
| 3) | ${}_i\sigma^{i+1}$ | Anregung eines K Elektrons in die L Schale |
| 4) | ${}_i\sigma^i$ | Ionisierung eines K Elektrons |
| 5) | ${}_i\sigma_i$ | Einfang eines Elektrons in die K Schale |
| 6) | ${}_i\sigma_{i-1}$ | K-Röntgenübergang |
| 7) | ${}_i\sigma_{i-2}$ | K-Augerübergang |

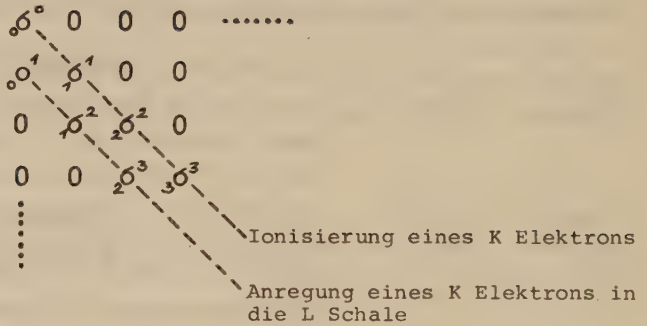
Diese Prozesse lassen sich in vier Wirkungsquerschnitt-Matrizen zusammenfassen:

1) $\{i\sigma_j\} =$

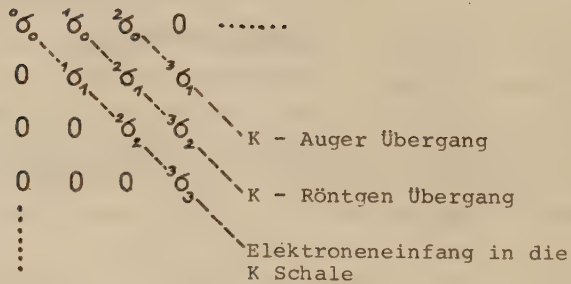


2) analog für $\{i\sigma^j\}$

3) $\{i\sigma^j\} =$



4) $\{i\sigma_j\} =$



Bei der hier gegebenen Darstellung sind nur Einelektronenprozesse bei Ionisierung, Anregung und Einfang berücksichtigt. Die Mehrelektronenprozesse lassen sich jedoch parallel zu den Diagonalelementen der jeweiligen Einelektronenprozesse einführen.

Für die zeitliche Änderung eines Zustands i gilt dann:

$$\dot{n}_i = \sum_j (n^j \sigma_{ji} + n_j \sigma_{ji} - n_i \sigma_{ij} - n_i \sigma_{ji})$$

bzw. für einen angeregten Zustand

$$\dot{n}^i = \sum_j (n_j \sigma_{ji} + n^j \sigma_{ji} - n^i \sigma_{ij} - n^i \sigma_{ji})$$

Die Lösung dieser gekoppelten Ratengleichungen beschreibt den Aufbau und die Abnahme der Besetzung eines Zustands i . Mit den Lösungen n^i und n_i kann dann z.B. sowohl die Röntgenausbeute als auch die Ladungsverteilung hinter der Folie beschrieben werden.

Röntgenausbeute:

$$Y^i = \int_{\text{innen}} \frac{dt}{\tau_R^i} n^i(t) + \int_{\text{außen}} \frac{dt}{\tau_R^i} n^i(t)$$

Ladungsverteilung:

$$N_i = \lim_{\substack{t \rightarrow \infty \\ \text{außen}}} n_i$$

3.4 Bestimmung der Lebensdauer angeregter Zustände

Die Ausbeutekurven für die einzelnen Multiplettzustände in Abbildung 21 sind nach 3.2 zu verstehen als die Summe von zwei Beiträgen, von denen einer konstant für alle Targetdicken bleibt (Produktion außerhalb des Targets), während der zweite (Produktion innerhalb des Targets) proportional zur Targetdicke anwächst.

Aus den Ausbeutekurven läßt sich dann nach der Beziehung

$$Y^i(t_0) = \frac{N_0^i}{\tau_R^i} (t_0 + \tau^i)$$

die totale Lebensdauer τ^i des angeregten Zustands i bestimmen.

Da die Werte von N_O^i und τ_R^i für die Targetdicken konstant sind, erhält man τ^i durch Bestimmung der Zeit t , bei der die Beiträge, die außerhalb der Folie emittiert werden gleich den Beiträgen sind, die innerhalb des Targets abgestrahlt werden. Die so gewonnene Zeit t ist die totale Lebensdauer τ^i .

Die so erhaltenen Lebensdauern für angeregte Zustände in Schwefel sind in Tabelle 7 im Vergleich mit theoretischen Werten zusammengestellt. Die erreichbare Genauigkeit der Messung ist am Beispiel der Lebensdauer des Übergangs $(2p)^2P - (1s)^2S$ zu sehen. Hier ist der theoretische Wert mit guter Genauigkeit bekannt, /25/, und fällt innerhalb des experimentellen Fehler mit dem gemessenen Wert zusammen.

Die Fehler der experimentellen Lebensdauern sind bestimmt durch die

Übergang	Lebensdauer $\tau^i (\times 10^{-14} \text{ sec})$	
	exp.	theor.
$(1s2p^2)^4P - (1s^22p)^2P$	>30	>100
$(1s2p^2)^2D - (1s^22p)^2P$		0.59
$(1s2p^2)^2P - (1s^22p)^2P$	0.9 ± 0.15	1.14
$(1s2p)^3P - (1s^2)^1S$	>70	≥ 100
$(1s2p)^1P - (1s^2)^1S$	1.7 ± 0.3	1.49
$(2p)^2P - (1s)^2S$	2.3 ± 0.4	2.44

Tabelle 7: Totale Lebensdauern von angeregten Multiplettzuständen in Schwefel

Fehler der Targetdicken der verwendeten Folien von 10 % bei den dünnen und 5 % bei den dicken Targets. Dalgarno und Parkinson haben die elektrischen Dipolmatrixelemente für die isoelektronische Helium Serie $(1snp)^1P - (1s^2)^1S$ berechnet /44/. Daraus ergibt sich für den Übergang $(1s2p)^1P - (1s^2)^1S$ in Schwefel eine Lebensdauer von 1.49×10^{-14} sec. Dies ist in guter Übereinstimmung mit dem experimentellen Wert von $(1.7 \pm 0.3) \times 10^{-14}$ sec.

Für den Übergang $(1s2p)^3P_1 - (1s^2)^1S_0$, der überwiegend die von uns beobachtete Linie 3 produziert, ergibt eine Extrapolation der theoretischen Werte von Drake und Dalgarno /30/ für Schwefel eine Lebensdauer von 1.6×10^{-12} sec. Experimente der Beam Foil Spectroscopy, die inzwischen von Cocke durchgeführt wurden, ergeben für diesen Übergang eine Lebensdauer von 1.57×10^{-12} sec /45/. In unseren Ergebnissen zeigt die Kurve eine nahezu konstante Ausbeute über den gemessenen Dickenbereich. Das bedeutet, daß die Lebensdauer τ^i groß gegen die Durchflugzeit t_0 ist. Eine Abschätzung der Steigung ergibt, daß die Lebensdauer größer als 0.7×10^{-12} sein sollte. Für die nicht aufgelösten Übergänge in Lithium-ähnlichem Schwefel (Linie 2) gilt, daß sowohl die Übergänge $(1s2p^2)^2P - (1s^22p)^2P$, $(1s2p^2)^2D - (1s^22p)^2P$ als auch der Übergang $(1s2s2p)^2P - (1s^22s)^2S$ erlaubt sind. Die theoretischen Lebensdauern für diese Übergänge liegen zwischen 0.6×10^{-14} und 1×10^{-14} sec /31/, was gut mit dem experimentellen Wert von $(0.9 \pm 0.15) \times 10^{-14}$ sec übereinstimmt.

Für die Übergänge zu Linie 1 in den Spektren haben wir eine Lebensdauer von größer als 1×10^{-12} sec gemessen. Auf Grund der beobachteten Übergangsenergie und der Auflösung können hier sowohl Übergänge von $(1s2p^2)^4P$ als auch von $(1s2s2p)^4P$ beobachtet werden. Theoretische Werte von Bhalla /31/ ergeben für die Übergänge $(1s2p^2) - (1s^22p)$ Lebensdauern von 7.7×10^{-12} sec für den Fall $^4P_{1/2} - ^2P_{1/2,3/2}$, 3.5×10^{-12} sec für $^4P_{3/2} - ^2P_{1/2,3/2}$ und 6.5×10^{-13} sec für den Fall $^4P_{5/2} - ^2P_{3/2}$.

Für die Übergänge $(1s2s2p) - (1s^22p)$ erhält man nach Bhalla 9.33×10^{-12} sec für $^4P_{3/2} - ^2S_{1/2}$, 2.57×10^{-11} sec für $^4P_{1/2} - ^2S_{1/2}$ und $.9 \times 10^{-9}$ sec für den Fall $^4P_{5/2} - ^2S_{1/2}$.

Für den Übergang $(1s2s2p)^4P_{5/2} - (1s^22p)^2S_{1/2}$ haben Cocke et al. mit Beam Foil Spectroscopy eine Lebensdauer von 1×10^{-9} sec gemessen /26/.

Nach der von uns vorgeschlagenen und hier beschriebenen Methode /42,43,46,47/, hat in der Zwischenzeit auch Cocke Lebensdauern von angeregten Zuständen in Schwefel bestimmt /45/. Seine Strahl-Targetkombination war 57 MeV S C. Seine Ergebnisse sind in Tabelle 8 zusammengefaßt

Übergang	Lebensdauer
$(1s2p)^1P_1 - (1s^2)^1S_0$	$1.25 \pm .3 \times 10^{-14}$ sec
$(1s2p)^2P - (1s^22p)^2P$	$1.06 \pm 0.2 \times 10^{-14}$ sec
$(1s2p)^4P - (1s^22p)^2P$	$2.5 \pm 0.5 \times 10^{-14}$ sec

Tabelle 8: Ergebnisse von Cocke für den Fall 57 MeV S C /45/

Die Werte für die E1 erlaubten Übergänge stimmen gut mit den von uns berichteten Lebensdauern überein. Lediglich für den $^4P - ^2P$ Übergang unterscheiden sich die Ergebnisse stark. Cocke gibt selbst als Deutung für die unerwartet kurze Lebensdauer seiner Messung eine nichtaufgelöste Beimischung von Beryllium-ähnlichen Übergängen an. Bei der niedrigeren Projektilenergie ist dies eine mögliche Erklärung für den Unterschied zu unseren Ergebnissen.

4. Gleichgewichtsbesetzungen angeregter Zustände

Auf Grund der Beziehung für die nichtproportionale Röntgenausbeute läßt sich die Gleichgewichtsbesetzung N_O^i ausdrücken als:

$$N_O^i = Y^i \frac{\tau_R^i}{t_0 + \tau^i}$$

Hierbei ist Y^i die Ausbeute an Strahlung bei einem Übergang i , t_0 die Durchflugzeit des Ions durch das ausgewertete Target und τ_R^i bzw. τ^i die strahlende bzw. die totale Lebensdauer für diesen Übergang. Die Bestimmung der Gleichgewichtsbesetzung ist für die Fälle erleichtert, in denen $\tau_R^i = \tau^i$ ist, d.h. in denen nur der strahlende Zerfallskanal erlaubt ist.

4.1 Besetzung angeregter Zustände für 92 MeV S auf C und Al

Für Wasserstoff-ähnliche und einfach angeregte Helium-ähnliche Zustände ist nur der Zerfall über Röntgenübergänge möglich. Hier ist die Fluoreszenzausbeute für die einzelnen Multipllettzustände gleich Eins, also $\tau_R^i = \tau^i$.

Die Gleichgewichtsbesetzungen für die Anregung von Schwefelatomen beim Beschuß von C und Al. Folien mit 92 MeV S sind in Tabelle 9 zusammengestellt.

	$\tau = \tau_R$	$N_O(C)$	$N_O(Al)$
$(2p)^2P$	2.44×10^{-14}	0.03	0.006
$(1s2p)^1P$	1.5×10^{-14}	0.04	0.03
$(1s2p)^3P$	1.6×10^{-12}	0.07	0.04
$(3p)^2P$	9.26×10^{-14}	0.003	-
$(4p)^2P$	2.15×10^{-13}	0.001	-

Tabelle 9: Gleichgewichtsbesetzungen von angeregten Zuständen in S-Atomen, angeregt in Stößen 92 MeV S $\rightarrow$ C, Al

Bei Übergängen in Lithium-ähnlichen Zuständen muß berücksichtigt werden, daß hier die Fluoreszenzausbeute nicht 1 ist, die Zustände also auch durch die Emission von Auger-Elektronen zerfallen können. Ergebnisse von Bhalla /31/ erlauben die Bestimmung von τ_R und τ für die einzelnen Multiplettzustände. Die daraus resultierenden Gleichgewichtsbesetzungen sind in Tabelle 10 dargestellt.

	τ_R	τ	$N_O(C)$	$N_O(Al)$
$(1s2p^2)^2P$	1.46×10^{-14}	0.8×10^{-14}	0.02	0.009
$(1s2p^2)^2D$	2.4×10^{-14}	0.55×10^{-14}	0.02	0.009
$(1s2p^2)^4P$	4.1×10^{-12}	1.13×10^{-12}	0.15	0.06

Tabelle 10: Gleichgewichtsbesetzung von Lithium-ähnlichen Zuständen

Bei der Bestimmung der Besetzungen ist für die Kohlenstoffdaten eine gesamte Schwefel K-Röntgenausbeute von $Y_i = 0.6$ Photonen/Ion und für die Aluminiumdaten von 0.2 Photonen/Ion verwendet worden.

Diese Werte wurden in Messungen mit dem Si(Li) Detektor und gleichzeitiger Absolutnormierung der Strahlintensität durch Messung von elastisch gestreuten Ionen gewonnen.

Bei der Untersuchung der S-Strahlung, die beim Beschuß von C-Folien emittiert wird, ist zusätzlich ein Maximum bei 2596 eV Übergangsenergie beobachtet worden. Dieser Übergang wurde als $(2p^2)^3P - (1s2p)^3P$ identifiziert; es können jedoch andere Multiplettzustände dieser Konfiguration zu der gemessenen Intensität beitragen. Für die $(2p^2)$ Zustände in Schwefel liegen keine experimentellen oder theoretischen Werte für strahlende und totale Lebensdauern vor. Bhalla hat theoretische Werte für Ne gerechnet /48/, bei denen auch Übergangsraten für den Zustand $(2p^2)$ angegeben werden. Hierbei zeigt sich, daß die strahlende

Übergangsrate des $(2p^2)$ wie erwartet etwa gleich der doppelten totalen Übergangsrate des $(2p)$ Zustands ist.

Zur Bestimmung der Fluoreszenzausbeute für den Zustand $(2p^2)$ in Schwefel kann man Werte von Bhalla für Neon /48/ und für Argon /49/ interpolieren und erhält dann $\omega_K(2p^2) = 0.6$ in Schwefel. Damit sind die Werte bekannt, die für die Bestimmung der Gleichgewichtsbesetzung benötigt werden.

	τ_R	τ	$N_O(C)$
($2p^2$)	1.22×10^{-14}	0.7×10^{-14}	0.007

Bei den angegebenen Besetzungen der angeregten Zustände wurde über die Spin-Bahn Aufspaltung gemittelt. Lediglich der Helium-ähnliche $(1s2p)^3P$ Zustand kann wegen der stark verschiedenen Lebensdauern der Zustände mit $J = 2$ und $J = 0$ von der beobachteten Lebensdauer separat für $J = 1$ angegeben werden.

Wegen der Unsicherheit der Verhältnisse von strahlender zu nicht-strahlender Übergangsrate ist der Fehler der Gleichgewichtsbesetzungen des $(2p^2)$ Zustands und der Lithium-ähnlichen Zustände $\pm 40\%$, während bei den Wasserstoff- und Helium-ähnlichen Zuständen der Fehler auf Grund der Unsicherheit von Photonenausbeute, Linienintensität und Lebensdauer $\pm 30\%$ beträgt.

4.2 Energieabhängigkeit der Multiplettintensität

Abbildung 24 zeigt einen Vergleich der beobachteten Schwefel-Strahlung im Energiebereich 2415 eV bis 2470 eV als Funktion der Projektilenergie. In der Zusammenstellung der drei Spektren zeigt sich deutlich die Verschiebung der beobachteten Übergangsenergie als Folge der unterschiedlichen Dopplerverschiebung für die verschiedenen Geschwindigkeiten.

Das bei 55 MeV Ionenenergie aufgenommene Spektrum stimmt in den Intensitäten gut mit den Ergebnissen von Cocke et al. /26/, siehe

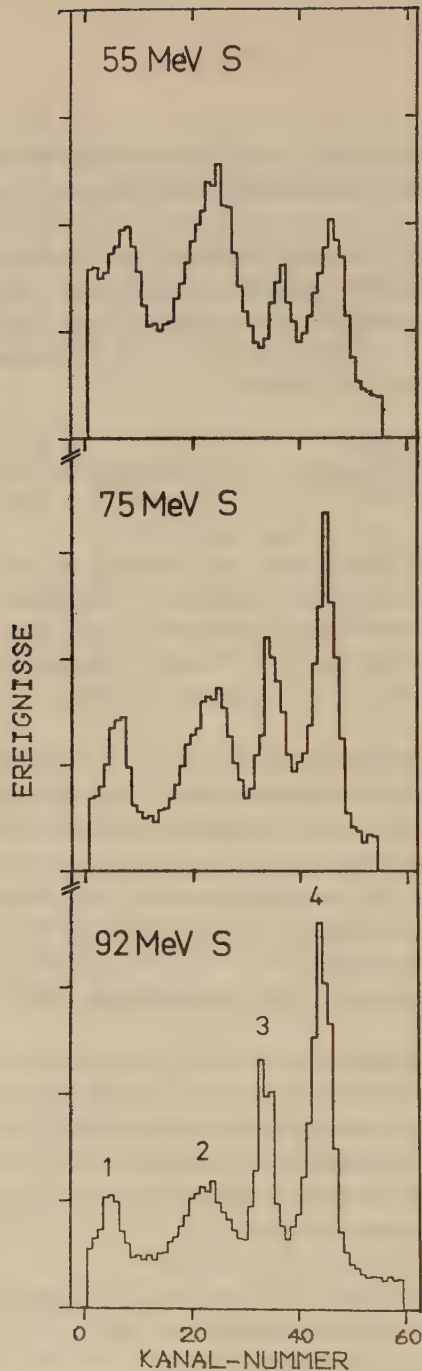


Abb. 24: Abhängigkeit der Multiplettintensität von Helium- und Lithium-ähnlichen Zuständen von der Energie der S-Ionen. Numerierung wie in Tab. 1.

Abbildung 19, überein. Der geringe Unterschied in den relativen Intensitäten kann durch die Wahl der Targetfolie bedingt sein. In allen hier verglichenen Spektren haben wir eine $150 \mu\text{g}/\text{cm}^2$ C Folie zur Anregung der Schwefelionen verwendet, während Cocke et al. keine Angaben über ihr Target geben.

Durch Anwendung der Beziehung für die Gleichgewichtsbesetzung N_{O}^{I} (siehe Einleitung zu 4.) läßt sich für ein Target die Besetzung der einzelnen Multipllettzustände in Abhängigkeit von der Projektilenergie ermitteln.

Da für die niedrigen Projektilenergien keine Photonen ausbeuten gemessen wurden, ist in Tabelle 11 nicht die absolute Gleichgewichtsbesetzung angegeben. Dieser Wert kann gegebenenfalls durch Multiplikation der N' Werte aus der Tabelle mit der K-Photonenausbeute für die jeweilige Energie erhalten werden. Bei den Ergebnissen ist jedoch zu beachten, daß hier nur die relative Intensität innerhalb des Übergangsenergiebereichs von 2415 bis 2470 eV angegeben sind. Die Abweichungen in Bezug auf das gesamte K Spektrum sollten jedoch innerhalb der Fehler von 30 % liegen. Bei den hohen Energien ist der Anteil an Beryllium-ähnlichen Zuständen zu vernachlässigen. Bei 55 MeV ist der Bruchteil von Wasserstoff-ähnlichen Zuständen ohne Bedeutung. Andererseits zeigen die Ergebnisse von Cocke /26,45/, daß auch bei 55 MeV Ionenenergie keine wesentliche Strahlungsanteile von Beryllium-ähnlichen Zuständen beobachtet werden.

	92 MeV	75 MeV	55 MeV
$(1s2p)^1P$	.11	.09	.05
$(1s2p)^3P_1$	.24	.22	.12
$(1s2p)^2P$	.04	.05	.08
$(1s2p)^2D$	.04	.05	.08
$(1s2p)^4P$	.3	.42	.42

Tab. 11: Relative Besetzung N' angeregter Zustände als Funktion der Projektilenergie

4.3 Vergleich mit Grundzustands-Ladungsverteilungen

Die Ergebnisse von Abschnitt 4.1 zeigen, daß beim Durchflug von 92 MeV Schwefelionen durch Kohlenstoff Targets im Gleichgewicht etwa 35 % der Ionen in angeregten Zuständen sind. Bei Aluminium Targets beträgt dieser Anteil etwa 15 %. In den beschriebenen Experimenten können auf Grund des Aufbaus nur Zustände ohne strahlenden Zerfallskanal oder mit einer Lebensdauer größer als 1×10^{-10} sec nicht beobachtet werden. Für Schwefelionen mit einem, zwei oder drei Elektronen sind dies lediglich $(2s)^2S$, $(1s2s)^1S$, $(1s2s)^3S$, $(1s2s^2)^2S$ und ein Feinstrukturzustand des $(1s2s2p)^4P$ Zustands. Die übrigen $(1s2s2p)$ Zustände sind mit der vorliegenden Auflösung energetisch nicht von den identifizierten $(1s2p^2)$ Zuständen zu trennen und sind dadurch anteilmäßig bereits in der Gesamtsumme enthalten. Unter der Annahme gleicher Besetzung wie Zustände mit einem 2p Elektron statt eines 2s Elektrons, erhält man mit einer Korrektur für die nicht beobachteten angeregten Zustände für Kohlenstofftargets einen Gesamtanteil von 50 % des Strahls in angeregten Zuständen. Bei Aluminium Targets sind 20 % des Strahls in angeregten Zuständen.

Aus den Gleichgewichtsbesetzungen läßt sich eine Ladungsverteilung der angeregten Zustände aufstellen. Danach sind beim Durchflug der 92 MeV Schwefelionen durch Kohlenstoff 13 % der angeregten Zustände Wasserstoff-ähnlich, 35 % Helium-ähnlich und 52 % Lithium ähnlich.

In Tabelle 12 ist ein Vergleich mit Messungen der Ladungsverteilungen für S-Ionen auf C Targets zusammengestellt. Die Ergebnisse für Umladung in Gas sind von Betz /50/ gewonnen, während die Folienresultate in Experimenten von Münzer /51/ erhalten wurden. In der Gleichgewichtsladungsverteilung wird die Verteilung aller Ionen nach der Relaxation der angeregten Zustände gemessen. Dagegen ist in der Verteilung auf Grund der Gleichgewichtsbesetzungen der Teil des Strahls im Grundzustand nicht enthalten.

	Anteil von angeregten Zuständen	Ladungsverteilung	
		Gas	Folie
S ¹⁶⁺	—	0.1 %	0.6 %
S ¹⁵⁺	13 %	0.6 %	11 %
S ¹⁴⁺	35 %	11 %	42 %
S ¹³⁺	52 %	42 %	34 %
S ¹²⁺	—	34 %	11 %
mittl. Ladung			
$\bar{q}$		12.5	13.5

Tabelle 12: Vergleich der relativen Anteile einzelner Ladungen

Das Maximum der Verteilung der angeregten Zustände liegt wie bei der Gas-Ladungsverteilung bei S¹³⁺. Insgesamt ist die Verteilung der angeregten Zustände innerhalb der Folie sehr ähnlich der Ladungsverteilung außerhalb der Folie. Die Abnahme des Anteils von S¹³⁺ außerhalb des Targets, und dadurch die Verschiebung des Maximums der Verteilung läßt sich durch die Möglichkeit von Auger-Übergängen der angeregten Zustände erklären. Dieser Zerfallskanal ist für die Wasserstoff- und Helium-ähnlichen Zustände ohne Bedeutung. Dagegen können die Lithium-ähnlichen Zustände zum großen Teil unter Emission von Auger-Elektronen in den Grundzustand übergehen. Dies ist auch nach Verlassen des Targets möglich. Dadurch verliert das Ion ein weiteres Elektron und das Maximum der Ladungsverteilung kann um eine Einheit zu höheren Ladungen verschoben werden.

5. Einfluß des Elektronen-Einfangs auf die relative Stärke von Hypersatelliten

5.1 Zwei Komponenten Modell für die Röntgenausbeute

Zur Beschreibung des Aufbaus der angeregten Zustände beim Durchflug durch das Target kann man vereinfachend annehmen, daß der gesamte Strahl aus drei Komponenten besteht /42/: einem Teil N_1 von Ionen, die ein K-Loch haben, dem Bruchteil N_2 von Ionen, die zwei Löcher in der K Schale haben und dem Anteil $(1 - N_1 - N_2)$, den Ionen mit voll besetzter K-Schale.

Dann gelten für die Änderungen der Besetzungen der einzelnen Anteile die Ratengleichungen

$$\begin{aligned}\dot{N}_1 &= (1 - N_1 - N_2) \sigma_1^P + N_2 \sigma_{21}^V - N_1 \sigma_1^V \\ \dot{N}_2 &= (1 - N_1 - N_2) \sigma_{02}^P + N_1 \sigma_{12}^P - N_2 \sigma_2^V\end{aligned}$$

Hierbei sind σ^P die Querschnitte für die Produktion dieser Zustände und σ^V die Vernichtungsquerschnitte. Die doppelten Indices beschreiben die Änderung der K-Schalen Besetzung während eines Stoßes: σ_{02}^P ist der Querschnitt für die doppelte Ionisierung in einem Stoß, während σ_{12}^P der Wirkungsquerschnitt für die Doppelionisierung in einem zweiten Stoß ist, nachdem in einem vorangehenden Stoß bereits ein K-Loch produziert wurde.

Für σ_1^P gilt mit der Ionisierungswahrscheinlichkeit $P(b) = P_0 e^{-b/b_0}$ als Funktion des Stoßparameters

$$\sigma_1^P = \int_0^\infty 2\pi b db P(b)$$

und damit für σ_{12}^P

$$\sigma_{12}^P = \sigma_1^P / 2$$

Im Einstoßprozess der zweifachen Ionisierung gilt

$$\sigma_{02}^P = \int_0^\infty 2\pi b db P^2(b)$$

damit

$$\sigma_{02}^P = \frac{P_0}{4} \sigma_1^P$$

Mit $P_0 \ll 1$ wird der bestimmende Prozeß für die Produktion von doppelt K-angeregten Zuständen der Zweistufenprozeß beschrieben durch σ_1^P und σ_{12}^P sein.

Andererseits sind die Besetzungen N_1 von 34 % des gesamten Strahls groß gegen die Anteile N_2 von 4 %. Dadurch vereinfacht sich die Ratengleichung für den Anteil N_1 zu

$$\dot{N}_1 = (1 - N_1) \sigma_1^P - N_1 \sigma_1^V$$

und man erhält im Gleichgewicht

$$N_0^{(1)} = \frac{\sigma_1^P}{\sigma_1^P + \sigma_1^V}$$

Für den Bruchteil von doppelt K-angeregten Ionen gilt dann

$$N_0^{(2)} = \frac{\sigma_{12}^P}{\sigma_2^V} N_0^{(1)}$$

In dieser Beschreibung erhält man statt des allgemeinen Ausdrucks für die beobachtete Röntgenausbeute die neue Beziehung

$$Y_1 = \frac{\sigma_1^P}{\sigma_1^P + \sigma_1^V} \cdot \frac{1}{\tau_1^R} (t_0 + \tau_1)$$

und für die Strahlung von Zuständen mit zwei Löchern in der K-Schale:

$$Y_2 = \frac{\sigma_{12}^P}{\sigma_2^V} \cdot \frac{\sigma_1^P}{\sigma_1^P + \sigma_1^V} \cdot \frac{1}{\tau_2^R} (t_0 + \tau_2) \quad .$$

5.2 Größe der Wirkungsquerschnitte

5.2.1 Relaxation durch strahlende und nichtstrahlende Übergänge

Gemäß der allgemeinen Beziehung

$$\sigma = \frac{1}{N \cdot v \cdot \tau}$$

mit N der Anzahl der Atome pro Einheitsvolumen, v der Projektilegeschwindigkeit und τ der totalen Lebensdauer läßt sich mit $\tau = 2 \times 10^{-14}$ sec der Abregungsquerschnitt σ^{deexc} für 92 MeV S auf Al angeben als

$$\sigma_{Al}^{deexc} = 3.5 \times 10^{-19} \text{ cm}^2$$

Bei C Targets ergibt sich

$$\sigma_C^{deexc} = 1.9 \times 10^{-19} \text{ cm}^2$$

Für metastabile Zustände mit einer totalen Lebensdauer von $\tau = 10^{-12}$ sec erhält man bei Aluminium

$$\sigma_{Al}^{deexc} = 7 \times 10^{-21} \text{ cm}^2$$

5.2.2 Ionisierung von K und L Elektronen

Aus der Arbeit von Garcia et al. /52/ erhält man für den Fall 92 MeV S auf Al mit einer K-Elektronenbindungsenergie in Schwefel von 3.2 keV als Ionisierungsquerschnitt für den Fall, daß nur noch 1 K Elektron anwesend ist:

$$\sigma_K^I = 5 \times 10^{-19} \text{ cm}^2$$

Für C als Target erhält man

$$\sigma_K^I = 9 \times 10^{-20} \text{ cm}^2$$

Für den analogen Fall der L Schale erhält man für Aluminium

$$\sigma_L^I = 5 \times 10^{-18} \text{ cm}^2$$

mit einer L-Elektronenbindungsenergie von .750 keV.

5.2.3 Einfang eines Elektrons in die K Schale

Die Grundlage für die Berechnung des Wirkungsquerschnitts für den Einfang eines Elektrons aus dem Target in einen gebundenen Zustand im Projektil ist die Theorie von Brinkman und Kramers /53/. Dabei werden Einfangquerschnitte im Rahmen der Born'schen Näherung berechnet. Der Einfang ist eine Folge der Coulomb-Wechselwirkung von Projektilkern und Targetelektron. Das Ergebnis von Brinkman und Kramers kann geschrieben werden als

$$\sigma^C = A q^2 E_K^4 E_i^{5/2} E_f^{3/2} [E_K^2 + 2E_K (E_i + E_f) + (E_i - E_f)^2]^{-5}$$

In dieser Formel ist $A = 2^{16} e^4 / 5 = 8.53 \times 10^{-16} \text{ keV}^2 \text{ cm}^2$, q die Ionenladung des Projektils, E_K die kinetische Energie eines Elektrons, das mit der Geschwindigkeit des Projektils fliegt. E_i und E_f sind die Bindungsenergien des Elektrons vor und nach dem Einfang. In der obigen Gleichung sind alle Energien in keV einzugeben. Der Wirkungsquerschnitt σ^C nach der obigen Formel beschreibt den Einfang aus einer vollen Schale des Targets in eine leere Schale des Projektils.

Nach dieser Formel erhält man für den Einfang eines Elektrons aus der K-Schale des Aluminiumtargets in die bereits mit einem Elektron besetzte K-Schale des Schwefel Projektils den Wirkungsquerschnitt

$$\sigma_{\text{Al}}^C = 3 \times 10^{-18} \text{ cm}^2$$

Für den Einfang aus der K Schale eines Kohlenstofftargets ergibt sich

$$\sigma_C^C = 3 \times 10^{-20} \text{ cm}^2$$

Hierbei sind $q = 14$ und $E_f = 3.2 \text{ keV}$ angesetzt worden. Die Beiträge für den Einfang aus äußeren Elektronenschalen sind wegen der großen Differenz der Elektronenenergie vor und nach dem Stoß 3 bis 6 Größenordnungen kleiner als der Beitrag der jeweiligen K Schale.

5.2.4 Anregung eines K Elektrons

Bates und Griffing zeigen, daß für Wasserstoff-ähnliche Atome bei Projektilgeschwindigkeiten v vergleichbar mit der Orbitalgeschwindigkeit des Elektrons, der Wirkungsquerschnitt für die Anregung eines $1s$ Elektrons in ein $2p$ Niveau etwa gleich dem Wirkungsquerschnitt für die Ionisierung des $1s$ Elektrons ist /54/. Da es sich bei den in unseren Experimenten vorliegenden Elektronenkonfigurationen um Wasserstoff-, Helium- und Lithium-ähnliche Ionen handelt, wird für die theoretischen Abschätzungen angenommen, daß der Querschnitt für die Anregung eines K-Elektrons σ^K^A gleich dem Querschnitt für die Ionisierung des Elektrons σ^K^I ist.

5.3 Theoretische Photonenausbeuten

Mit den Wirkungsquerschnitten aus 5.2 und den Ergebnissen von 5.1 läßt sich eine theoretische Photonenausbeute für die Produktion von Schwefel K-Strahlung in Stößen von 92 MeV S Ionen mit Al und C Folientargets berechnen.

Dabei sind $\sigma^K^P = \sigma^K^I + \sigma^K^A$ und $\sigma^K^V = \sigma^K^C + \sigma^K^{deexc}$

Damit berechnete Photonenausbeuten für Targetdurchflugzeiten von $t_0 = 2 \times 10^{-14}$ sec sind in Tabelle 12 mit experimentellen Ergebnissen verglichen.

	Y_{exp}	$Y_{theoret}$ (Photonen/Ion)
Al	0.2 ± 0.05	0.25
C	0.6 ± 0.3	0.4

Tabelle 13: Vergleich von experimentellen S(K) Photonenausbeuten mit theoretischen Werten für den Fall
92 MeV S $\rightarrow$ Al, C.

Die Übereinstimmung der experimentellen Ergebnisse mit den nach der vereinfachten Theorie in 5.1 berechneten theoretischen Werten ist überraschend gut.

5.4 Verhältnis der Röntgenausbeuten von Zuständen mit einem und zwei Löchern in der K-Schale

Ausgehend von der Ratengleichung für ein Zwei-Komponenten System sind in 5.1 zwei Beziehungen für die Ausbeute von Röntgenstrahlung von Schwefelionen mit einem und mit zwei K-Löchern gewonnen worden. Hieraus läßt sich der Quotient Y_2/Y_1 bilden, der mit experimentellen Ergebnissen von Messungen mit dem Si(Li) Detektor verglichen werden kann.

$$Y_2/Y_1 = \frac{\sigma_{12}^P}{\sigma_2^V} \cdot \frac{\tau_1^R (t_0 + \tau_2)}{\tau_2^R (t_0 + \tau_1)}$$

Für den Vergleich ist es zweckmäßig, die experimentellen Werte umzurechnen, so daß man mit der Näherung $\sigma^I = \sigma^A$ erhält

$$\frac{2\sigma_{12}^I}{\sigma_2^V} = \frac{Y_2}{Y_1} \cdot \frac{\tau_2^R (t_0 + \tau_1)}{\tau_1^R (t_0 + \tau_2)}$$

Den Quotient $2\sigma_{12}^I/\sigma_2^V = 2\sigma_{12}^I/(\sigma_2^C + \sigma_2^{deexc})$ kann man zum Vergleich theoretisch berechnen.

Die Berechnung des σ^I als Funktion des Targets erfolgt nach der Arbeit von Garcia et al. /52/. Dabei muß die effektive Targetkernladung Z_{eff} für den Stoß bekannt sein. Z_{eff} ist bestimmt durch die geometrischen Verhältnisse beim Stoß und beschreibt die Abschirmung der Targetkernladung durch Targetelektronen. Für die rechnerische Auswertung für $4 \leq Z \leq 70$ wurde Z_{eff} angenommen als

$$Z_{eff} = 0.77 Z$$

Dieser Wert wurde durch Glättung von theoretischen Werten erhalten, die auf Grund eines mittleren Stoßparameters $\bar{b} = 0.46 \times 10^{-9}$ cm berechnet wurden.

Damit ist der K-Schalenionisierungsquerschnitt eines Elektrons in 95 MeV S beim Beschuß von Targets der Kernladung Z bestimmt als

$$\sigma^I = 2 \times Z^2 \times 10^{-21} \text{ cm}^2$$

Für diesen Wirkungsquerschnitt wird eine Bindungsenergie des Elektrons von 3.2 keV verwendet.

Bei dieser Beschreibung der Ionisierung wird angenommen, daß es sich nur um Ionisierung auf Grund von Coulombwechselwirkung handelt. Untersuchungen von Winters et al. /55/ zeigen, daß es bei kleinen Projektilenergien ($v/v_0 \ll 1$) Abweichungen von der Coulombionisierung gibt. Es treten Oszillation im K-Ionisierungsquerschnitt in Abhängigkeit von Z_2 auf, die für höhere Projektilgeschwindigkeiten nicht mehr beobachtet werden. Ergebnisse von Winters et al. zeigen für Cl bereits bei einer Projektilenergie von 45 MeV ein Verschwinden der Oszillationen. Daher scheint die Annahme gerechtfertigt, im Fall von 95 MeV S nur Coulomb-Ionisierung zu betrachten.

Bei der Berechnung des Wirkungsquerschnitts σ_2^c für den Elektroneneinfang in das S-Projektil wurde eine leere K-Schale mit einer Elektronenbindungsenergie von 3.4 keV angenommen. Für die schwereren Targets, bei denen nicht nur aus der K-Schale eingefangen wird, müssen Annahmen über die Wichtung der Beiträge der einzelnen Unterschalen des Targets getroffen werden. Da der Einfangquerschnitt durch den Überlapp der Wellenfunktion von Anfangs- und Endzustand bestimmt wird, ist der Beitrag für ein Elektron mit $l \neq 0$ kleiner als der Beitrag von einem Elektron der gleichen Elektronenschale.

Für die Auswertung wurde angenommen, daß innerhalb der L-Schale gilt: Die Summe der Beiträge von den 2s-Elektronen ist gleich der Summe der Beiträge der 2p-Elektronen ($\sum \sigma(2s) = \sum \sigma(2p) = 0.5$). In der Target-M-Schale soll gelten, daß die Beiträge der 3s-Elektronen gleich den Beiträgen von 3p- und 3d-Elektronen ist, von denen die 3p-Elektronen 4mal so stark beitragen wie die 3d-Elektronen. ($\sum \sigma(3s) = 0.5, \sum \sigma(3p) = 0.4, \sum \sigma(3d) = 0.1$)

Durch Aufsummation der einzelnen Beiträge erhält man dann für jedes Target den Einfangquerschnitt σ^c in die Schwefel-K-Schale.

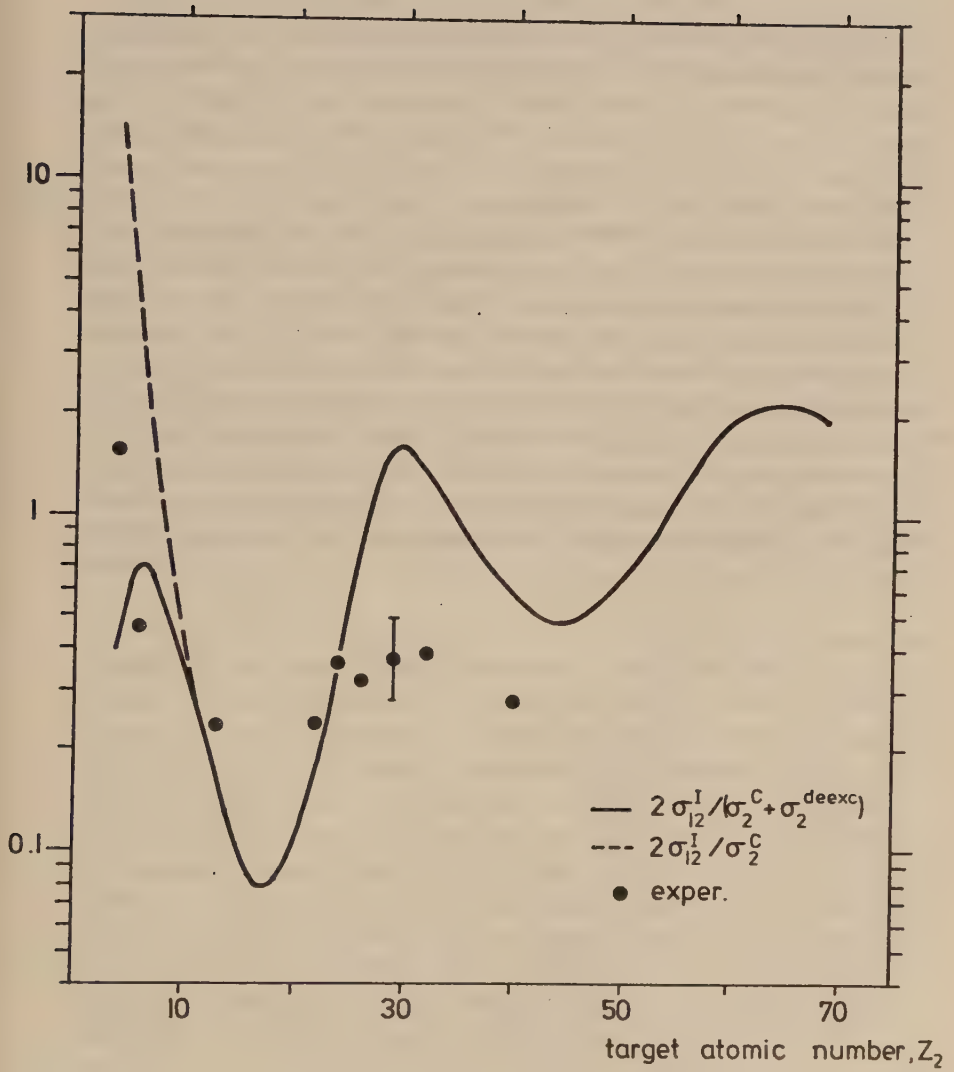


Abb. 25: Vergleich des berechneten Quotienten $2\sigma_{12}^I / \sigma_2^V$ mit experimentellen Werten für verschiedene Targets.
(95 MeV S)

In Abbildung 25 wird die so erhaltene theoretische Kurve für $2 \sigma_{12}^I / \sigma_2^V$ als Funktion des Targets verglichen mit experimentellen Ergebnissen für diesen Quotienten. Für Be und C wurde als τ_1 ein τ_{eff} von 8×10^{-15} sec verwendet (siehe 3.2), während für die übrigen Targets $\tau_1 = 2 \times 10^{-14}$ sec angesetzt wurde. Die durchgezogene theoretische Kurve zeigt den Quotienten $2 \sigma_{12}^I / (\sigma_2^C + \sigma_2^{\text{deexc}})$, während die gestrichelte Kurve die Näherung zeigt, in der σ_2^{deexc} als klein gegen σ_2^C vernachlässigt wird. Diese Abweichung wird nur für $Z_2 < 10$ relevant. Die Werte sind nicht gegenseitig normiert. Für diesen Vergleich wurden Röntgenspektren ausgewertet, die mit einem Si(Li) Detektor aufgenommen wurden. Abb. 26 zeigt einen direkten Vergleich der Röntgenspektren für verschiedene Targets der Dicke $100 \mu\text{g}/\text{cm}^2$. In den Spektren sind A und C die K_α und K_β Strahlung von einfach K angeregtem Schwefel. B und D sind die Hypersatelliten in doppelt K-angeregtem Schwefel. Bei der Beurteilung der guten Übereinstimmung von Theorie und Experiment in Abbildung 25 darf nicht vergessen werden, daß gerade die Wirkungsquerschnitte

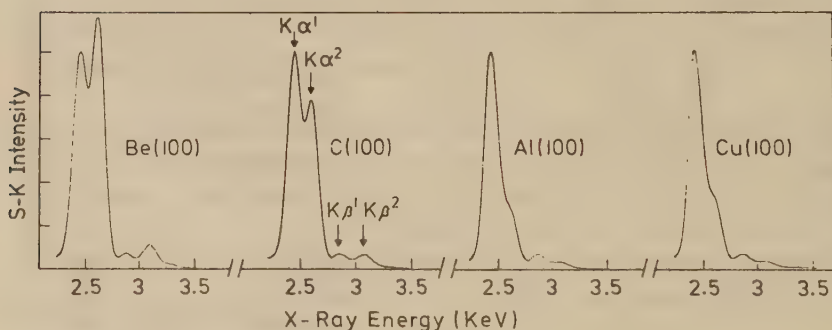


Abb. 26: Vergleich von S(K) Röntgenspektren für verschiedene Targets der Dicke $100 \mu\text{g}/\text{cm}^2$ (Si(Li) Detektor)

für den Elektroneneinfang mit einem großen Fehler behaftet sind. In der Formel nach Brinkman und Kramers wird nicht berücksichtigt, daß der Einfangquerschnitt durch die Abstoßung von Projektil und Targetkern reduziert wird. Diese Verringerung kann bis zu einem Faktor 10 betragen /56/.

Die Struktur der Kurve in Abb. 25 ist zu verstehen, wenn man beachtet, daß der Einfangquerschnitt hoch ist, wenn Anfangs- und Endgeschwindigkeit des eingefangenen Elektrons nahe zusammen liegen. Großer Einfangquerschnitt bedeutet kleiner Quotient $2 \sigma^I / \sigma^V$, d.h. bei den Minima der Kurve sind Anfangs- und Endenergie des Elektrons ähnlich. Im ersten Minimum liegen die K Niveaus von Projektil und Target energetisch nahe beieinander, während im zweiten Minimum Projektil K- und Target L-Schale dicht beisammen liegen. Das Abnehmen der Oszillation wird durch das Anbieten einer steigenden Zahl von Targetelektronen bedingt, deren Energien aber nicht mehr so starke Unterschiede zeigen.

Das ausgeprägte erste Maximum für $Z \leq 10$ stimmt gut überein mit Messungen von Ladungsverteilungen für Ionen nach Umladung in Folien. Nach Durchflug durch Be Folien werden höhere Gleichgewichtsladungen beobachtet als für den Durchflug durch C, während beide deutlich höhere Gleichgewichtsladungen liefern als Al-Folien /57/. Der Grund hierfür ist der kleine Einfangquerschnitt beim Durchflug durch Folien aus einem Material mit kleiner Kernladung. Das kleine Y_2/Y_1 Verhältnis für Al im Vergleich zu Kohlenstoff zeigt sich auch in den Spektren, die mit dem Kristallspektrometer aufgenommen wurden. Für C Folien beträgt die Intensität des (2p)-(1s) Übergangs in Wasserstoff-ähnlichem Schwefel im Spektrum etwa 2/3 der Intensität des $(1s2p)^1P - (1s^2)^1S$ Übergangs. (siehe Abbildung 16,17) Beim Beschuß von Al wird dagegen nur 1/5 der Intensität des $(1s2p)^1P - (1s^2)1s$ Übergangs beobachtet. (siehe Abbildung 27) Das Verhältnis der Röntgenausbeuten vom angeregten Zuständen mit einem bzw. zwei Löchern in der K Schale läßt sich für

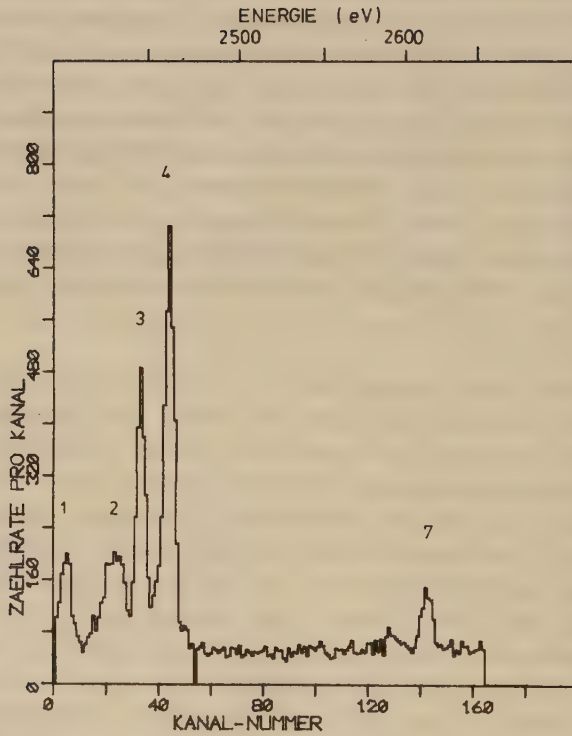


Abb. 27: S(K) Röntgenspektrum für 92 MeV S auf $108 \mu\text{g}/\text{cm}^2$ Al ADP Analysatorkristall

festes Z_2 als Funktion der Targetdicke auswerten. Der Quotient $\sigma_{12}^P / \sigma_2^{V_2}$ ist dann konstant.

Experimentelle Spektren für den Fall 95 MeV $\rightarrow$ C sind in Abbildung 28 zusammengestellt. Bei der Beurteilung dieser Messungen mit einem Si(Li) Detektor ist zu beachten, daß ein 150 μm Kohlenstoffabsorber vor dem Detektor angebracht war, dessen Einfluß nicht korrigiert wurde. Dadurch sind die Hypersatelliten B und D im Vergleich zu den Übergängen in einfach angeregtem Schwefel weniger gedämpft und erscheinen relativ stärker. In Abbildung 29 ist ein Vergleich der theoretischen Kurve $Y_2/Y_1(t_0)$ mit den experimentellen Daten gezeigt. Für die Berechnung der theoretischen Werte wurden wegen der nicht zu vernachlässigenden Aufbauzeit $\langle t_a \rangle$ in Kohlenstofftargets effektive Lebensdauern $\tau_1^{\text{eff}} = 8 \times 10^{-15}$ und $\tau_2^{\text{eff}} = 1 \times 10^{-15}$ eingesetzt. (siehe 3.2) Es zeigt sich, daß auch die Abhängigkeit des Verhältnisses Y_2/Y_1 von t_0 von dem einfachen Modell gut beschrieben wird. Beide Kurven sind absolut und nicht aufeinander normiert. Für kleine Targetdicken ist eine größere Abweichung zwischen Theorie und Experiment zu erwarten, da hier kein Gleichgewicht der Besetzung vorliegt, das in dem theoretischen Ansatz angenommen wird.

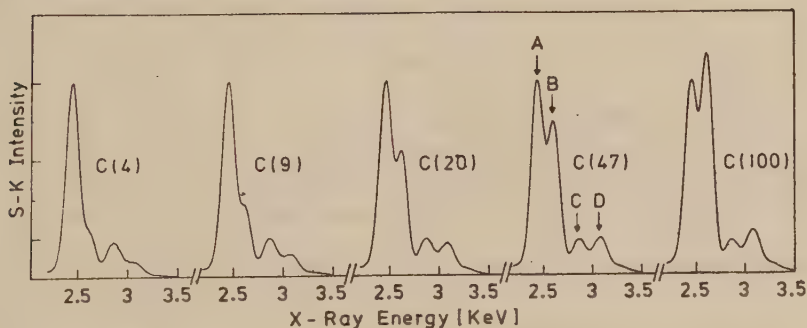


Abb. 28: Vergleich der S(K) Röntgenspektren für C-Folien der Dicke 9 $\mu\text{g}/\text{cm}^2$ bis 100 $\mu\text{g}/\text{cm}^2$. (Si(Li) Messungen mit 150 μm C Absorber)

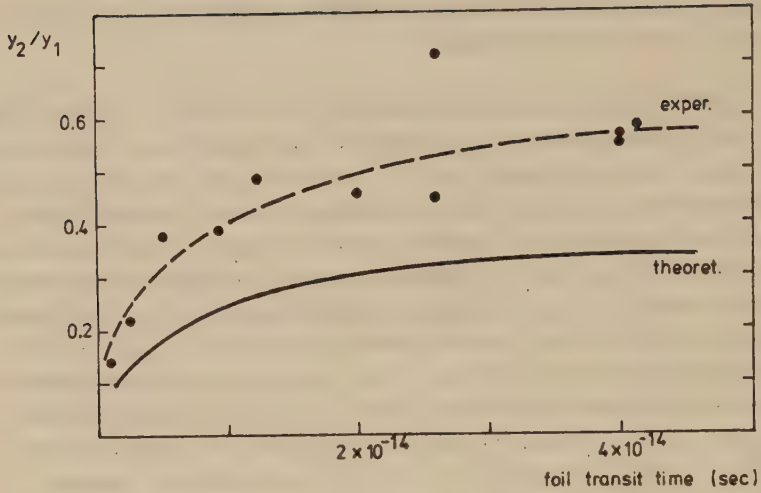


Abb. 29: Vergleich des berechneten Verhältnis Y_2/Y_1 mit experimentellen Werten für Kohlenstoff Folien verschiedener Dicke.
(95 MeV S)

Literaturverzeichnis

- /1/ M. Welz, Diplomarbeit Universität München (1974)
- /2/ G. Kalkoffen, Diplomarbeit Universität München (1974)
- /3/ H. Mette, Diplomarbeit Universität München (1970)
- /4/ M.A.Blochin, Methoden der Röntgenspektralanalyse, B.G. Teubner, Leipzig (1963)
- /5/ W. Stehling, Diplomarbeit Universität München (1975)
- /6/ E.A. Sandström, in Handbuch der Physik, Band XXX, Springer, Berlin (1957)
- /7/ N.A. Dyson, X-rays in atomic and nuclear physics, Longman, London (1973)
- /8/ C.G. Darwin, Phil.Mag. 27 (1914), 315
- /9/ J.A. Prins, Z. Phys. 63 (1930), 477
- /10/ A. Burek, Los Alamos Scientific Laboratory, private Mitteilung
- /11/ G. Bertolini und G. Restelli, in Atomic Inner Shell Processes, Band II, ed. B. Craseman, Academic Press, New York (1975)
- /12/ H.W.Schnopper, H.-D. Betz, J.P. Delvaille, K. Kalata, A.R. Sohval, K.W. Jones und H.E. Wegner, Phys. Rev. Lett. 29 (1972), 898
- /13/ J.H. Macek und J.S. Briggs, J.Phys. B 7 (1974), 1312
- /14/ H.-D. Betz, M. Kleber, E. Spindler, F. Bell, H. Panke und W. Stehling, in Proceedings of the IX. International Conference on the Physics of Electronic and Atomic Collisions, Seattle, wird veröffentlicht
- /15/ H.D. Betz, in Proceedings of the Heavy Ion Summer Study, Oak Ridge (1972), CONF-720669
- /16/ F. Bell, H.-D. Betz, H. Panke, E. Spindler, W. Stehling und M. Kleber, Phys. Rev. Lett. 35 (1975), 841
- /17/ H.-D. Betz, F. Bell, H. Panke, W. Stehling, E. Spindler und M. Kleber, Phys. Rev. Lett. 34 (1975), 1256

- /18/ J.D. Garcia und J.E. Mack, J.Opt.Soc.Amer.55 (1965), 654
- /19/ C. Froese Fischer, Comp. Phys.Comm. 4 (1972), 107
- /20/ J.P. Desclaux, Comp. Phys. Comm. 9 (1975), 31
- /21/ I.P. Grant, Adv. Physics 19 (1970), 747
- /22/ I.I. Sobel'man, Introduction to the Theory of Atomic Spectra, Pergamon, Oxford (1972)
- /23/ J.C. Slater, Quantum Theory of Atomic Structure, Band I u. II, McGraw-Hill, New York (1960)
- /24/ B. Fricke, Gesamthochschule Kassel, private Mitteilung
- /25/ H.A. Bethe und H.E. Salpeter, Quantum Mechanics of One- and Two-Electron Atoms, Academic Press, New York (1957)
- /26/ C.L. Cocke, B. Curnutte und R. Randall, Phys. Rev. A 9 (1974), 1823
- /27/ R. Schmieder, Phys. Rev. A 7 (1973), 1458
- /28/ J.R. Mowat, I.A. Sellin, R.S. Peterson, D.J. Pegg, M.D. Brown, J.R. Mac Donald, Phys. Rev. A 8 (1973), 145
- /29/ R.C. Elton, Astrophys. J. 148 (1967), 573
- /30/ G.W.F. Drake und A. Dalgarno, Astrophys.J.157 (1969), 459
- /31/ C.P. Bhalla und A.H. Gabriel, zur Veröffentlichung in Beam Foil Spectroscopy, eds. I.A. Sellin und D.J. Pegg, Plenum Press
- /32/ L.C. Northcliffe und R.F. Shilling, Nucl. Data 7 A (1970), 233
- /33/ E. Condon und G. Shortley, Theory of Atomic Spectra, Cambridge University Press, Cambridge (1935)
- /34/ R. Snyder, J. Phys. B 3 (1970), L 77
- /35/ R. Snyder, J.Phys. B 4 (1971), 934
- /36/ K.D. Sevier, Low Energy Electron Spectrometry, Wiley (Interscience), New York (1972)
- /37/ R.W. Fink, in Atomic Inner Shell Processes, Band II ed. B. Craseman, Academic Press, New York (1975)

- /38/ M.A. Blochin, Physik der Röntgenstrahlen, VEB Verlag Technik, Berlin (1957)
- /39/ P. Kirkpatrick und H.H. Pattee jr, in Handbuch der Physik, Band XXX, Springer, Berlin (1957)
- /40/ A.B.C. Walker jr., und H.R. Rugge, Astrophys. J. 164 (1971), 181
- /41/ H.-D. Betz, F. Bell, H. Panke, G. Kalkoffen, M. Welz und D. Evers, Phys. Lett. 49A (1974), 133
- /42/ H.-D. Betz, F. Bell, H. Panke, G. Kalkoffen, M. Welz und D. Evers, Phys. Rev. Lett. 33 (1974), 807
- /43/ H. Panke, F. Bell, H.-D. Betz, W. Stehling, E. Spindler und R. Laubert, Phys.Lett. 53A (1975), 457
- /44/ A. Dalgarno, E.M. Parkinson, Proc. Roy. Soc. A 301 (1967), 253
- /45/ C.L. Cocke, zur Veröffentlichung in Beam Foil Spectroscopy, eds. I.A. Sellin und D.J. Pegg, Plenum Press
- /46/ H. Panke, F. Bell, H.-D. Betz und W. Stehling, Verhandl. DPG (VI) 10 (1975), 36
- /47/ H. Panke, F. Bell, H.-D. Betz und W. Stehling, zur Veröffentlichung in Nucl.Instr.Meth. (1976)
- /48/ C.P. Bhalla, N.O.Folland und M.A. Hein, Phys. Rev. A 8 (1973), 649
- /49/ C.P. Bhalla, Phys. Rev. A 8 (1973), 2877
- /50/ H.-D. Betz, Universität München, private Mitteilung
- /51/ H. Münzer, Beschleunigerlabor der Universität und der Technischen Universität München, private Mitteilung
- /52/ J.D. Garcia, R.J. Fortner, T.M. Kavanagh, Rev. Mod. Phys. 45 (1973), 111
- /53/ H.C. Brinkman und H.A. Kramers, Proc.Acad. Sci. (Amsterdam) 33 (1930), 973

- /54/ D.R. Bates und G. Griffing, Proc. Phys. Soc A 66
(1953), 961
- /55/ L. Winters, M.D. Brown, L.D. Ellsworth, T. Chiao,
E.W. Pettus und J.R. MacDonald, Phys. Rev. A 11
(1974), 174
- /56/ J.D. Jackson und H. Schiff, Phys. Rev. 89 (1953), 359
- /57/ H.-D. Betz, Rev.Mod.Phys. 44 (1972), 465

Mein Dank gilt

Herrn Prof. Dr. F. Bell für die Anregung dieser Arbeit und sein überaus großes Interesse an ihrem Gelingen.

Der Abteilung Kernphysik der LMU für die Unterstützung und die Möglichkeit, dieses Projekt am Beschleunigerlabor der Universität und der Technischen Universität München durchführen zu können.

Herrn Prof. Dr. R. Sizmann und Herrn Prof. Dr. Č. Zupančič für die Bereitstellung von Mitteln ihrer Lehrstühle und für die guten Arbeitsmöglichkeiten im Rahmen beider Lehrstühle.

Herrn Univ. Doz. Dr. H.-D. Betz und den Mitgliedern seiner Arbeitsgruppe für die hervorragende Zusammenarbeit, wobei der Einfallsreichtum von Herrn W. Stehling bei der Automatisierung der Spektrometersteuerung die Durchführung der Experimente wesentlich erleichterte.

Lebenslauf

31. August 1946	Geboren in Storkow, Kreis Fürstenwalde als Sohn des Dipl.Chemikers Hans Panke und seiner Frau Elfriede, geb. Simon
November 1950	Umzug nach West-Berlin
April 1953	Einschulung in die 6. Grundschule, Berlin-Tiergarten
Juni 1955	Umzug nach München, Eintritt in die Volksschule an der Werdenfelsstraße
September 1957	Übertritt in die Klenze-Oberrealschule, München
August 1964	AFS-Stipendium zum Besuch von 'The Phillips Exeter Academy', Exeter, N.H., USA
Juni 1965	Graduation und Abschlusßdiplom, The Phillips Exeter Academy
Juli 1966	Abitur am Klenze-Gymnasium
Oktober 1966	Einberufung zum Wehrdienst bei der Bundeswehr
März 1968	Zeitgemäße Entlassung als Fahnenjunker (ROA)
April 1968	Immatrikulation und Beginn des Physik Studiums an der Universität München
August 1970	Diplom-Vorprüfung in Physik
April 1971	Beginn der experimentellen Diplomarbeit am Lehrstuhl Prof. Dr. R. Sizmann
Oktober 1972	Diplom-Hauptprüfung in Physik
November 1972	Anstellung bei der Sektion Physik der Universität München, Beginn der Dissertation
Januar 1975	Bestellung zum Mitglied des Forschungskollegiums des Beschleunigerlabors der Universität und der Technischen Universität München

